

Kevés szabadsági fokú kvantumrendszerek dinamikai tulajdonságai

Doktori értekezés

Darázs Zoltán

Készült: MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet,
Kvantumoptikai és Kvantuminformatikai Osztály

Témavezető:

Kiss Tamás, Ph.D.

tudományos főmunkatárs

MTA Wigner FK SZFI Kvantumoptikai és Kvantuminformatikai Osztály

Konzulens:

Csordás András, D.Sc.

docens

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

ELTE TTK Fizika Doktori Iskola

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája program

Doktori iskola vezetője: Dr. Palla László, egyetemi tanár

Doktori program vezetője: Dr. Kürti Jenő, egyetemi tanár

Budapest, 2015



Tartalomjegyzék

Bevezetés és motiváció	1
I. Kvantumos bolyongások dinamikai tulajdonságai	5
1. Irodalmi előzmények	7
1.1. Klasszikus véletlen bolyongás	7
1.1.1. Diszkrét idejű véletlen bolyongás	7
1.1.2. Folytonos idejű véletlen bolyongás	8
1.2. Kvantumos bolyongások általánosan	11
1.3. A folytonos idejű kvantumos bolyongás	12
2. Folytonos idejű kvantumos bolyongás dinamikus perkolált gráfokon	17
2.1. Irodalmi áttekintés	17
2.2. A véletlen unitér dinamika analitikus leírása	18
2.2.1. Egy rendszer időfejlődése	18
2.2.2. Szuperoperátor formalizmus	22
2.3. Numerikus eredmények	23
2.3.1. Analitikus eredmények szemléltetése	24
2.3.2. Véges lépésköz vizsgálata	27
2.3.3. Az időfelbontás finomítása	30
2.4. Következtetések	32
3. Folytonos idejű kvantumos bolyongások tulajdonságai Sierpiński-fraktálokon	33
3.1. Irodalmi áttekintés	33
3.1.1. Sierpiński-fraktálok	34
3.1.2. Spektrál dimenzió	35
3.1.3. Lokalizáció vizsgálata	42
3.1.4. Csapdázás modellezése	45
3.2. Duális Sierpiński-háromszög	48
3.3. Sierpiński-háromszög	51
3.4. Duális Sierpiński-szőnyeg	54

3.5. Sierpiński-szőnyeg	56
3.6. Következtetések	60
II. Bose-Einstein kondenzátum és nanovezető csatolása	65
4. Irodalmi áttekintés	67
4.1. Parametrikus erősítés bemutatása	68
5. Parametrikus erősítés BEC-nanovezeték hibrid rendszerben	73
5.1. A rendszer modellezése	73
5.1.1. A kondenzátum leírása	74
5.1.2. A nanovezeték modellezése	78
5.1.3. Csatolás a nanovezeték és a Bose-Einstein kondenzátum között	82
5.2. A mozgásegyenletek megoldása	84
5.2.1. A kondenzátum diszkretizálása	84
5.2.2. Gravitáció és veszteségek figyelembevétele	86
5.2.3. A csatolási állandó küszöbértékének meghatározása	89
5.2.4. Közelítő analitikus megoldás	94
5.2.5. Numerikus eredmények	97
5.3. Következtetések	103
A dolgozatban bemutatott eredmények összefoglalása	105
Köszönetnyilvánítás	110
Publikációs jegyzék	113
Irodalomjegyzék	115

Bevezetés és motiváció

A múlt század első felében született meg a modern fizika egyik alappillére, a kvantummechanika, mely életre hívta a hétköznapi jelenségeken, azaz a mára már klasszikus fizikának nevezett elméleten túlmutató, kvantumos gondolkodásmódot [1]. Ezen új szemléletmód egyik érdekes tétele a valószínűségi értelmezés (koppenhágai interpretáció), mely szerint egy részecskének nincs a klasszikus értelemben vett „helye” és „sebessége”, hanem egy valószínűségi jelentést hordozó hullámfüggvénnyel tudjuk leírni.

Véletlen folyamatokkal találkozhatunk a klasszikus fizikában is. Tegyük fel például, hogy egy úthálózatban aszerint fordulunk jobbra illetve balra, hogy egy érmével fejet vagy írást dobunk [2]. Ez az egyik legegyszerűbb példája a klasszikus véletlen bolyongásnak [3, 4], mely mára kiterjedt irodalommal rendelkezik: a véletlen bolyongáson alapuló modelleket sikeresen alkalmazták több tudományágban is, például a Brown-mozgás leírására [5], a fraktálok növekedésének modellezésére [6], sőt akár az állatok vándorlásának leírására is [7].

A klasszikus illetve a kvantumos rendszerekben előforduló véletlenszerűség azonban alapvetően más természetű. Klasszikus rendszerekben a véletlenszerűség abból ered, hogy bizonyos paramétereket nem, vagy csak nem megfelelő pontossággal ismerünk, például az érme feldobása esetén a feldobás erősségéből és az érme kezdeti helyzetéből meg tudnánk mondani, hogy mi lesz a végeredmény. Egy kvantummechanikai rendszer esetén a rendszer pillanatnyi állapotát a hullámfüggvény segítségével bármely időpillanatban le tudjuk írni, a véletlen akkor lép színre, amikor a rendszeren mérést hajtunk végre. A mérés eredményeként a rendszer beugrik a mérőoperátor egyik sajátállapotába, azonban azt, hogy melyikbe, a mérés előtti hullámfüggvény pontos ismeretében sem feltétlenül tudjuk biztosan megmondani [8].

A kvantumos bolyongás [9] a klasszikus véletlen bolyongás kvantumos változata, melyben a bolyongó helyének egy kvantumos rendszer egy szabadsági foka, azaz egy kvantumállapot felel meg [10]. A kvantumos bolyongás esetén az irodalomban a „véletlen” szót általában nem használják, mivel a fenti gondolatmenet alapján amíg nem hajtunk végre mérést a rendszeren, addig

az időfejlődése determinisztikusan meghatározható. A kvantumos bolyongásoknak az időfejlődés szempontjából alapvetően két fajtája van: a diszkrét- és a folytonos idejű kvantumos bolyongás [11–13]. A klasszikus esetben a kétféle időfejlődés között nincs jelentős különbség (a kétfajta bolyongás egymásba ágyazható [14]), a kvantumos bolyongások esetén azonban ilyen egyértelmű megfeleltetés egyelőre nem ismert [15–17].

Mind a klasszikus, mind a kvantumos bolyongás leírásához szükségünk van egy gráfra, mely azt mutatja meg, hogy a bolyongó által bejárható állapotok milyen struktúra szerint követik egymást. Ez a gráf alapvetően meghatározza a bolyongás dinamikáját, például a folytonos idejű kvantumos bolyongás esetén a rendszert leíró Hamilton-operátor mátrix-reprezentációja a gráf Laplace-mátrixa [18]. A gráf jelentőségét az is mutatja, hogy már kis megváltoztatásával is jelentős különbségeket tapasztalunk a bolyongás dinamikájában [19]. A bolyongást leíró gráfot megváltoztathatjuk a bolyongás során is például úgy, hogy adott időközönként bizonyos éleket adott valószínűséggel elveszünk, ez a dinamikus perkoláció [20]. Különböző zajok hatását a kvantumos bolyongásokra már többen is vizsgálták [21–24], és a dinamikus perkoláció is felfogható egyfajta zajforrásként.

A diszkrét idejű kvantumos bolyongások esetén megmutatták, hogy sok lépés után perkolált gráfon történő bolyongás esetén az aszimptotikus állapotok között van olyan, amely nem az egyenletes eloszláshoz tart, hanem maradhatnak oszcillációk a rendszerben [25–27]. A diszkrét idejű esetben a sok lépéshez hosszú idő elteltére van szükség, ezzel szemben a folytonos idejű kvantumos bolyongás dinamikája megengedi, hogy véges időtartam alatt vizsgáljuk a sok lépés utáni állapotot. Ezt a kérdéskört tanulmányozzuk a dolgozat 2. fejezetében.

A klasszikus és kvantumos bolyongások a transzport- és diffúziós folyamatok egyik lehetséges modelljeként is szolgálnak [18, 28], gondoljunk például a már említett Brown-mozgásra. A transzport hatékonyságának egyik mérőszáma annak a valószínűsége, hogy a bolyongót ismét a kiindulás helyén mérjük, melyet visszatérési valószínűségnek nevezünk [2, 29, 30]. A klasszikus bolyongások esetén a visszatérési valószínűség időfüggése a legtöbb gráf esetén jól jellemezhető a gráf beágyazási dimenziójával [31]. Az önhasonló alakzatok, például fraktálok esetén a klasszikus bolyongás ettől eltérő viselkedést mutat, a beágyazási dimenzió szerepét a spektrál dimenziónak nevezett mennyiség veszi át [32]. A kvantumos bolyongások esetén a klasszikus esetben definiált spektrál dimenzió nem alkalmazható, a transzport és a kvantumos bolyongások dinamikai tulajdonságait más módszerekkel kell vizsgálni. A dolgozat 3. fejezetében ezt a módszert fogom bemutatni és alkalmazni a Sierpiński-háromszögön, a Sierpiński-szőnyegen,

valamint a gráfok duálisán történő folytonos idejű kvantumos bolyongás esetén.

A kvantummechanika kialakulásakor az új szemléletmód mellett jelentkezett egy alapvető hiányosság, mely a korábbi elméletekre nem volt jellemző: pont a legegyszerűbb elméleti modelleket nem lehetett kísérletileg megvalósítani, így ezekkel hosszú ideig gondolkísérletek formájában, csupán elméletileg lehetett dolgozni. A 1980-as években jelentek meg az első ilyen jellegű kísérletek, ennek elismeréseként a 2012. évi fizikai Nobel-díjat Serge Haroche és David Wineland kapták az egyedi kvantumrendszereken végzett kvantummechanikai alapkísérleteikért [33–35].

Hasonlóan sokat váratott magára a Bose és Einstein által már az 1920-as években elméletileg megjósolt [36, 37], azóta róluk elnevezett Bose-Einstein kondenzátum atomokkal történő kísérleti megvalósítása is. Az elméleti jóslat szerint nagyon alacsony hőmérsékleten, ha az atomok fázistérbeli sűrűsége elég nagy, akkor egy jelentős részük ugyanazt a kvantumállapotot foglalja el (anélkül hogy molekulák képződnének), és az atomok makroszkopikus sokasága kvantumos tulajdonságokat mutat. A kísérleti megvalósításhoz a legnagyobb nehézséget a kritikus hőmérséklet elérése jelentette. Bose-Einstein kondenzátumot elsőként 1995-ben hoztak létre, különböző hűtési módszerek (lézeres hűtés, párologtatásos hűtés) egymás utáni alkalmazásával [38].

Napjainkra a kísérleti technológia olyan fejlettségi szintre jutott, hogy nem csupán egyedi kvantumrendszereket, hanem különböző (például spin és rezgési) szabadsági fokok csatolásával úgynevezett hibrid kvantumrendszereket is tudunk vizsgálni [39, 40]. Ilyen rendszer lehet például egy Bose-Einstein kondenzátum [41] és egy nanoméretű oszcillátor csatolt rendszere [42, 43]. A nanoméretű oszcillátor lehet egy szén nanocső is [44], melyen áramot vezetünk keresztül, és a nanocső rezgéséből származó váltakozó mágneses tér hozza létre a magnetomechanikai csatolást a nanocső és a Bose-Einstein kondenzátum között. Ebben az elrendezésben egy egyszerű modell segítségével kollégáim megmutatták, hogy a kondenzátumból kilépő gerjesztett atomok számából következtethetünk a nanocsőben folyó áram karakterisztikus tulajdonságaira [45].

Az atomok lézeres hűtése [46–48] fontos szerepet játszik a Bose-Einstein kondenzátum létrehozásában. Ugyanakkor a lézereket [49–51] a fizika sok más területén is alkalmazzák, például lézerek segítségével koherens fényt tudunk előállítani, amelyet pumpaként használva nemlineáris optikai elemek [52] révén egy jel amplitúdóját növelni tudjuk. Ezt az eljárást az irodalomban optikai parametrikus erősítésnek nevezzük [53].

A dolgozat II. részében egy hibrid kvantummechanikai rendszert fogunk tanulmányozni,

melyben egy Bose-Einstein kondenzátum és egy rezgő nanoméretű áramvezető magnetomechanikai csatolását vizsgáljuk. Ahogy említettem, ilyen rendszert kollégáim korábban már tanulmányoztak [45], a nanodrót mágneses terének hatását vizsgálták a kondenzátum atomjaira, miközben feltették, hogy a nanovezeték tulajdonságai a kölcsönhatás során alig változnak. Az általam vizsgált jelenséghez a kérdéskört más oldalról kell megközelíteni, az általam feltett kérdés az, hogy mennyire befolyásolja a két rendszer közti csatolás a nanovezeték mechanikai rezgését. Mint látni fogjuk, a rendszer analógiát mutat az említett optikai parametrikus erősítéssel.

A dolgozat I. részében folytonos idejű kvantumos bolyongásokat fogok vizsgálni különböző gráfokon. Az 1. fejezetben bemutatom a bolyongás modelljét. A 2. fejezetben perkolált gráfokon történő folytonos idejű kvantumos bolyongások esetén a gyors perkoláció hatását vizsgálom meg. A 3. fejezetben Sierpiński-fraktálokon történő folytonos idejű kvantumos bolyongások transzporttulajdonságait tanulmányozom. A dolgozat II. részében Bose-Einstein kondenzátum és nanoméretű áramvezető magnetomechanikai csatolását vizsgálom. A 4. fejezetben bemutatom az optikai parametrikus erősítést, a 5. fejezetben pedig megmutatom, hogy a vizsgált hibrid kvantumrendszerben a magnetomechanikai csatolás hogyan vezet a nanovezeték mechanikai rezgésének parametrikus erősítésére. Az általános irodalmi áttekintő fejezeteken túl az egyes fejezetek előtt szintén található egy irodalmi áttekintő, mely az adott témakörhöz kapcsolódó, kevésbé általános fogalmak ismeretanyagába ad betekintést.

I. rész

Kvantumos bolyongások dinamikai tulajdonságai

1. fejezet

Irodalmi előzmények

Ebben a fejezetben a kvantumos bolyongás fogalmát és az alapvető definíciókat vezetjük be, például az átmeneti valószínűséget és a visszatérési valószínűséget ismertetjük.

1.1. Klasszikus véletlen bolyongás

1.1.1. Diszkrét idejű véletlen bolyongás

A klasszikus véletlen bolyongással sok fizikai folyamatot modellezhetünk a Brown-mozgástól [5] a fraktálnövekedésig [6]. A legegyszerűbb esetben a bolyongó a valós tengelyen a nullából indulva mozog, és adott időközönként $1/2$ valószínűséggel átlép valamelyik szomszédos egész számra (\mathbb{Z} -n történő bolyongás) [4]. Az átlépés ebben a modellben adott időközönként történik, ezért *diszkrét idejű bolyongásnak* nevezzük. Amennyiben a bolyongó nem csak adott időközönként, hanem bármikor megváltoztathatja a helyét, folytonos idejű bolyongásról beszélünk [54].

A diszkrét idejű esetben a bolyongó T időközönként lép. A véletlenszerűség annak köszönhető, hogy a bolyongó T időközönként feldob egy érmét, ami eldönti hogy pozitív vagy negatív irányban lépjen át a szomszédos egész számra. Jelöljük a bolyongó helyét az n -ik lépés után S_n -el. Nyilvánvaló, hogy páratlan lépés után csak páratlan, páros számú lépés után pedig csak páros pontban lehet. Vizsgáljuk azt az esetet, amikor a bolyongó $2n$ lépés után a $2k$ pontba jutott el, ahol $k, n \in \mathbb{Z}$. Ehhez $2k$ -szor kellett az adott irányba lépnie, valamint ezen felül még $n - k$ lépést mindkét irányba, utóbbiak sorrendje szabadon választható. Ezen megfontolások alapján

annak a valószínűsége, hogy $2n$ lépés után a $2k$ pontban vagyunk:

$$\Pr\{S_{2n} = 2k\} = \binom{2n}{n-k} 2^{-2n}. \quad (1.1)$$

Hasonló gondolatmenettel belátható, hogy ugyanez páratlan lépés esetén:

$$\Pr\{S_{2n+1} = 2k+1\} = \binom{2n+1}{n-k} 2^{-(2n+1)}. \quad (1.2)$$

Ezen megfontolások magasabb dimenzióban (\mathbb{Z}^d -n történő bolyongás) is alkalmazhatóak [4]. Adott számú lépés után egy kiválasztott pontban való tartózkodás valószínűsége kombinatorikai megfontolások alapján határozható meg.

1.1.2. Folytonos idejű véletlen bolyongás

A folytonos idejű esetben a bolyongó bármikor léphet, így ott nem lehet az előzőekhez hasonló kombinatorikai megfontolásokat alkalmazni. Egy adott pontban való tartózkodás valószínűségét az idő, és nem a lépések számának függvényében tudjuk csak megadni [13, 55]. Tegyük fel, hogy adott egy $G(V, E)$ irányítatlan gráf, ahol V a csúcsok, E pedig az élek halmaza. A bolyongó egy lépésben egyik csúcsból a másikba léphet át, feltéve, hogy a két csúcs szomszédos, azaz összeköti őket egy él. Ha ez nem lehetséges, akkor a bolyongó nem léphet az adott csúcsba egy lépés alatt. Két csúcsot, v_1 -et és v_2 -t ($v_1, v_2 \in V$) akkor nevezzünk szomszédosnak, ha összeköti őket egy él, azaz létezik $e \in E$ úgy, hogy $e = \{v_1, v_2\}$. Tegyük fel továbbá, hogy adott egy γ időfüggetlen konstans, amely annak a valószínűsége, hogy egységnyi idő alatt a bolyongó a pillanatnyi helyéről átlép egy másik csúcsba. Jelöljük a gráf egyes csúcsait $1, \dots, N$ indexekkel, annak a valószínűségét pedig, hogy a bolyongó t idő alatt a j csúcsból eljut a k csúcsba $p_{k,j}(t)$ -vel. Tegyük fel, hogy egy lépés alatt a bolyongó csak a szomszédos csúcsokba léphet át, és vezessük be a következő elemekkel leírható mátrixot:

$$T_{k,j} = \begin{cases} -\gamma, & \text{ha } j \text{ és } k \text{ szomszédosak,} \\ 0, & \text{ha } j \text{ és } k \text{ nem szomszédosak,} \\ d\gamma, & \text{ha } j = k, \end{cases} \quad (1.3)$$

ahol d az adott csúcs fokszáma, egy lépésben ennyi pontból érkezhethet ide a bolyongó. A negatív előjel az első esetben abból ered, hogy a bolyongó elléphet az adott pontból. Az (1.3) mátrix -1-szeresét a bolyongást leíró ún. *transzfer mátrixnak* is nevezik [18]. A γ konstans megválaszthatjuk úgy is, hogy $\gamma = 1$ legyen, ez az időegység megválasztásával is elérhető. Ekkor az

(1.3)-al definiált mátrix a gráf ún. *Laplace-mátrixa* [56]. Ha feltesszük, hogy $\varepsilon\gamma \ll 1$, akkor annak a valószínűsége, hogy ε idő alatt j -ből k -ba jut a bolyongó,

$$p_{k,j}(\varepsilon) = \begin{cases} -\varepsilon T_{k,j} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), & \text{ha } j \neq k \\ 1 - \varepsilon T_{k,j} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), & \text{ha } j = k. \end{cases} \quad (1.4)$$

Feltéve, hogy a rendszernek nincs memóriája, azaz a mozgás csak az adott pozíciótól függ (Markov-folyamat), bármely t_1 és t_2 időpontra fennáll az alábbi, ún. Chapman-Kolmogorov-egyenlet [57]:

$$p_{k,j}(t_1 + t_2) = \sum_l p_{k,l}(t_2) p_{l,j}(t_1). \quad (1.5)$$

Ez alapján

$$p_{k,j}(t + \varepsilon) = \sum_l p_{k,l}(\varepsilon) p_{l,j}(t). \quad (1.6)$$

Ebből (1.4) alapján kis ε értékekre kapjuk, hogy

$$p_{k,j}(t + \varepsilon) = p_{k,j}(t) - \varepsilon \sum_l T_{k,l} p_{l,j}(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (1.7)$$

Ezt átrendezve:

$$\frac{p_{k,j}(t + \varepsilon) - p_{k,j}(t)}{\varepsilon} = - \sum_l T_{k,l} p_{l,j}(t). \quad (1.8)$$

Így az $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetben $p_{k,j}(t)$ -re egy differenciálegyenletet kapunk:

$$\frac{d}{dt} p_{k,j}(t) = - \sum_l T_{kl} p_{l,j}(t). \quad (1.9)$$

Ennek megoldása a $p_{k,j}(0) = \delta_{j,k}$ kezdeti feltétellel

$$p_{k,j}(t) = (e^{-\mathbf{T}t})_{k,j}. \quad (1.10)$$

Tehát a t idő alatt a j csúcsból a k csúcsba jutás valószínűsége az $e^{-\mathbf{T}t}$ mátrix k -adik sorának j -edik eleme [13]. A kvantumos esettel való jobb összehasonlíthatóság miatt vezessünk be egy új jelölésrendszert. Az egyes pozíciókat jelöljük $|n\rangle$, $\{n = 1 \dots N\}$ módon, ahol N az összes lehetséges pozíció, azaz a gráf csúcsainak száma. Ezzel a jelöléssel az átmeneti valószínűség

$$p_{k,j}(t) = \langle k | e^{-\mathbf{T}t} | j \rangle = \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle k | q_n \rangle \langle q_n | j \rangle, \quad (1.11)$$

ahol λ_n és $|q_n\rangle$ a \mathbf{T} mátrix sajátértékei illetve sajátvektorai [18].

Visszatérési valószínűség

Az imént megmutattuk, hogyan lehet kiszámolni annak a valószínűségét, hogy a bolyongó a gráf egyik csúcsából eljut egy másikba. Most nézzük meg azt, milyen valószínűséggel tér vissza az indulás helyére. Jelöljük ezt a mennyiséget

$$P_0^c(t) \equiv p_{0,0}(t) \quad (1.12)$$

módon, a definíció pedig egyszerűen megadja a kiszámítás módját is az (1.11) képlet alapján. A 0 index természetesen lehet más is, attól függően, hogy hogyan jelöltük a gráf csúcsait, és ezek közül melyiket választjuk kezdeti állapotnak. Pólya György magyar származású matematikus után Pólya-féle számnak [2] is nevezik annak a valószínűségét, hogy a bolyongó valaha visszatér az indulás helyére. Vegyük a $\{t_i\}$ időpontokat, ekkor nézzük meg, hogy a bolyongó az indulás helyén van-e. Annak a valószínűsége, hogy a bolyongó a t_i időpontban nincs az origóban nyilván $1 - P_0^c(t_i)$. Azok az események, hogy az n -edik mérés után nincs az origóban független események, így annak a valószínűsége, hogy a bolyongó az n mérés során nem volt az indulás helyén

$$\bar{\mathcal{P}}_n = \prod_{i=1}^n [1 - P_0^c(t_i)]. \quad (1.13)$$

Ennek ellentett eseménye az, hogy az n mérés során legalább egyszer már visszatért, így véve az $n \rightarrow \infty$ határesetet annak a valószínűsége, hogy a bolyongó valaha visszatér az indulás helyére

$$\mathcal{P} \equiv 1 - \prod_{i=1}^{\infty} [1 - P_0^c(t_i)] \quad (1.14)$$

módon írható, ez a *Pólya-féle szám* definíciója. Létezik egy ettől kissé eltérő definíció is, mely szerint a Pólya-féle szám csak 1 vagy 0 lehet (*zero-one law*) [4]. Eszerint a definíció szerint a Pólya-féle szám nem annak a valószínűsége, hogy legalább egyszer visszatér, hanem annak, hogy végtelen sokszor visszatér a bolyongó. Ha $\mathcal{P} = 1$, akkor a két definíció ugyanazt adja, hiszen ha egyszer visszatért, akkor az egész bolyongást tekinthetjük úgy hogy újraindult, és ez végtelen sokszor ismétlődhet. Ha $\mathcal{P} < 1$, akkor már a legalább egyszeri visszatérés valószínűsége is kisebb egynél, így a végtelen sokszor való visszatérés valószínűsége nulla. Mi a későbbiekben az (1.14) definíciót fogjuk használni. Ha egy adott rendszerre ez a típusú Pólya-féle szám 1, akkor az azt jelenti, hogy a bolyongó biztosan vissza fog térni az indulás helyére, ekkor a bolyongást *visszatérőnek* nevezzük. Ha a Pólya-féle szám egynél kisebb, akkor van véges valószínűsége annak, hogy a bolyongó soha nem tér vissza, ez az *elszökő bolyongás*.

Ha a bolyongásra transzportfolyamatként tekintünk, akkor az $1 - P_0^c(t)$ mennyiség azt mutatja meg, hogy milyen gyors a terjedés a rendszerben, azaz mekkora valószínűséggel hagytuk el az indulás helyét. A visszatérési valószínűség jól jellemzi a rendszer transzport- és egyéb tulajdonságait, ezért mind a klasszikus, mind pedig a kvantumos bolyongások irodalmában nagy számú publikáció született a témában [2, 29, 30, 58–64].

Átlagos visszatérési valószínűség

Ha minden lehetséges helyre, mint indulási állapotra átlagoljuk a visszatérési valószínűséget, akkor kapjuk az *átlagos visszatérési valószínűséget* [18],

$$\bar{p}(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N p_{j,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t} \langle q_n | \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j| q_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-\lambda_n t}. \quad (1.15)$$

Mint látható, a fenti mennyiség csak a λ_n sajátértékektől függ, a sajátvektoroktól nem. Ez egyrészt megkönnyíti a használatát, másrészt betekintést ad a rendszer állapotába hosszú idő után. Az (1.3) egyenletben definiált T mátrixnak egy olyan vektor, melynek minden eleme 1 mindig sajátvektora, a hozzá tartozó sajátérték pedig a 0. A nulla csak egyszeres sajátérték, az átlagos visszatérési valószínűség tehát az idővel az $1/N$ értékhez tart, a gráf struktúrájától függetlenül, mivel a nulla a legkisebb sajátérték [65].

1.2. Kvantumos bolyongások általánosan

A kvantumos esetben a bolyongást leíró gráf állapotainak kvantumállapotokat feleltetünk meg [18, 66, 67]. A rendszer unitér időfejlődése szempontjából a kvantumos bolyongás alapvetően kétféle lehet: diszkrét [9, 11, 12] és folytonos idejű [13]. A diszkrét idejű bolyongásnak több altípusa is van. Az egyik modellben a rendszer Hilbert-tere kiegészül egy extra érmeterrel [68], annak analógiájaként, mintha a klasszikus bolyongó minden lépésben egy érme feldobásával döntené el hogy merre lép (*coined walk*). A másik diszkrét idejű modellben, melyet nevezhetünk szórásos kvantumos bolyongásnak is (*scattering walk*), nem szükséges érmeter, a bolyongást a gráf élei segítségével írják le [69]. A diszkrét idejű kvantumos bolyongásoknak létezik egy Markov-láncokon alapuló definíciója is (*Szegedy walk*) [70].

A klasszikus folytonos idejű bolyongásba beágyazható egy diszkrét idejű, így a két bolyongás tulajdonságai megfeleltethetők egymásnak bizonyos keretek között [14]. A folytonos és diszkrét idejű kvantumos bolyongások kapcsolata aktívan kutatott terület [15–17], azonban

ilyen egyértelmű megfeleltetés egyelőre nem ismert, hiszen például a diszkrét idejű bolyongás esetén a bolyongó Hilbert-tere egy extra érmetérrel is kiegészülhet.

A kvantumos esetben a rendszerben nincs a klasszikus értelemben vett véletlenszerűség: a rendszer kvantumállapota minden időpillanatban ismert, a gráf (és bizonyos esetekben az érmeoperátor) által egyértelműen meghatározott. A véletlenszerűség például a rendszeren végrehajtott projektív mérés során jelentkezik, mikor is a rendszer beugrik a mérőoperátor egyik sajátállapotába, ennek valószínűségét azonban adott rendszerre ki tudjuk számolni.

A kvantumos bolyongásokat több szempontból is érdemes vizsgálni. Az első természetesen az alap kutatás, mely a klasszikus bolyongások gazdag ismeretanyagát egészíti ki kvantumos rendszerekre [18,66,67]. A kutatások másik fő mozgatórugóját a bolyongáson alapuló kvantum-algoritmusok adják [71–73]. A kvantuminformatikai alkalmazások legnagyobb előnye, hogy a kvantumos bolyongást használó keresési algoritmusok kvadratikusan gyorsabbak lehetnek mint az adott problémára alkalmazható klasszikus algoritmusok [74–77]. A folytonos idejű kvantumos bolyongáson alapuló algoritmusok, mint például a gráfbejárési algoritmusok pedig akár exponenciálisan hatékonyabbak lehetnek a klasszikus megfelelőjükénél [78]. A kvantumos bolyongás felfogható úgy is, mint a kvantumszámítógép egy lehetséges univerzális paradigmája, ahol a kódot teljes egészében a bolyongás gráfja jelenti [79,80].

Az elmúlt években a kvantumos bolyongásokat több kísérletben is megvalósították [10], többek között optikai rácsban található atomokkal [81,82], vagy magmágneses rezonancia révén [83]. Kvantumoptikai eszközökkel is valósítottak meg diszkrét idejű kvantumos bolyongást [84], a folytonos idejű kvantumos bolyongások implementálása pedig optikai hullámvezetők (*optical waveguide*) [85–87] révén történhet. Ezekben a kísérletekben a hullámvezetőkben terjedő fény a bolyongó, az egyes hullámvezetők pedig az állapotoknak felelnek meg, a szomszédos hullámvezetők között a csatolást a hullámvezető közelében jelen lévő evanescens hullámok valósítják meg. Ebben az elrendezésben az idő múlásának a hullámvezetőben megtett távolság felel meg [87,88].

1.3. A folytonos idejű kvantumos bolyongás

Időfejlődés

A klasszikus folytonos idejű bolyongásból a következő módon kapjuk meg a bolyongás kvantumos megfelelőjét: a $G(V, E)$ irányítatlan gráfban az N csúcsnak feleltessük meg egy

N dimenziós Hilbert-tér teljes ortonormált $\{|a\rangle : a = 0 \dots N - 1\}$ bázisát, ezek lesznek a kvantumállapotok, amiken a bolyongás történik [13]. A rendszer Hamilton-operátorának elemei a klasszikus esetben használt (1.3) mátrix alapján:

$$\langle a | \hat{H} | b \rangle = \begin{cases} -\gamma, & \text{ha } |a\rangle \text{ és } |b\rangle \text{ szomszédos állapotok,} \\ 0, & \text{ha } |a\rangle \text{ és } |b\rangle \text{ nem szomszédosak,} \\ d\gamma, & \text{ha } |a\rangle = |b\rangle. \end{cases} \quad (1.16)$$

A Schrödinger-egyenletet felírva

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (1.17)$$

a rendszer időfejlődését biztosító operátor $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$ alakú ($\hbar = 1$ egységben). A rendszer állapotát t idő elteltével a következőképpen határozhatjuk meg:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle. \quad (1.18)$$

Átmeneti valószínűség

Ha ismerjük a rendszer időfejlődését, akkor ki tudjuk számolni az átmeneti valószínűségeket is [13, 18]. Tegyük fel, hogy a rendszer kezdetben a $|j\rangle$ helyen (állapotban) volt, és annak a valószínűségét keressük, hogy t idő múlva a $|k\rangle$ állapotban lesz. Ekkor a $\pi_{k,j}(t)$ átmeneti valószínűség

$$\pi_{k,j}(t) \equiv \left| \langle k | e^{-i\hat{H}t} | j \rangle \right|^2 = |\alpha_{k,j}(t)|^2, \quad (1.19)$$

ahol bevezettük az

$$\alpha_{k,j}(t) \equiv \langle k | e^{-i\hat{H}t} | j \rangle \quad (1.20)$$

átmeneti amplitúdót (*transition amplitude*), mely az (1.11) klasszikus átmeneti valószínűséggel analóg módon számítható. Ha a Hamilton-operátor sajátértékeit illetve sajátállapotait rendre E_n illetve $|\phi_n\rangle$ módon jelöljük, akkor

$$\pi_{k,j}(t) = |\alpha_{k,j}(t)|^2 = \left| \langle k | e^{-i\hat{H}t} | j \rangle \right|^2 = \left| \sum_n e^{-iE_n t} \langle k | \phi_n \rangle \langle \phi_n | j \rangle \right|^2. \quad (1.21)$$

Visszatérési valószínűség

A kvantumos bolyongások esetén is megkérdezhetjük, hogy a bolyongó milyen valószínűséggel tér vissza a kezdeti helyre, állapotba. Jelöljük ezt a valószínűséget

$$P_0(t) \equiv \pi_{0,0}(t) = |\alpha_{0,0}(t)|^2 \quad (1.22)$$

módon az (1.12) klasszikus visszatérési valószínűséghez hasonlóan. Kvantumos bolyongások esetén a Pólya-féle szám, azaz annak a valószínűsége, hogy a bolyongót valaha az indulás helyén mérjük nem magától értetődő. A klasszikus esetben alkalmazott definíciót a $P_0(t)$ valószínűség segítségével is definiálhatjuk

$$\mathcal{P} \equiv 1 - \prod_{i=1}^{\infty} [1 - P_0(t_i)] \quad (1.23)$$

módon, azonban van egy fontos különbség a kvantumos és a klasszikus definíció között. Klasszikus rendszerekben bármikor megnézhetjük, hogy a bolyongó visszatért-e, vagy akár folyamatosan nyomon is követhetjük. Kvantumos rendszerek esetén a mérés drasztikusan befolyásolhatja a rendszer tulajdonságait: a rendszeren túl sűrűn mérve felléphet a kvantum Zénón-effektus [8], túl ritkán mérve pedig elszalaszthatjuk a visszatérés pillanatát. Már egyetlen projektív mérés is megzavarhatja a rendszer unitér időfejlődését, mivel a mérés után a rendszer állapota beugrik a méréshez használt operátor egyik sajátállapotába, vagyis az állapotok szuperpozícióját elveszítjük, a további dinamika más lesz mint mérés nélkül lett volna. A kvantumos bolyongások visszatérési tulajdonságaival több cikk is foglalkozott [62–64]. A folytonos idejű kvantumos bolyongások Pólya-féle számára diplomamunkámban én is adtam egy lehetséges, mérési eljárás alapján alapuló javaslatot [IV]. Az ott felhasznált mérési eljárást úgy definiáltuk, hogy feltettük, hogy rendelkezésünkre áll egy azonos módon fejlesztett rendszerekből álló sokaság, és minden mérést ennek egy-egy különböző elemén hajtunk végre, azaz minden mérés egy új, addig zavartalan időfejlődésű rendszeren történik. Ezen mérési eljárás használatával belátható, hogy periodikus és Poisson-folyamat alapján alapuló mérési idősort véve a Pólya-féle szám értéke a $P_0(t)$ valószínűség lecsengésének gyorsaságától függ. Ha $P_0(t)$ hosszú időt véve közelíthető $f(t)t^{-\delta}$ módon, ahol $f(t)$ az idő periodikus vagy kváziperiodikus függvénye, akkor $\delta \leq 1$ esetén a bolyongás visszatérő, $\delta > 1$ esetén pedig elszökő.

Átlagos visszatérési valószínűség

A klasszikus esetben bevezetett átlagos visszatérési valószínűséghez hasonlóan a kvantumos esetben is bevezethetjük a $\bar{\pi}(t)$ *átlagos visszatérési valószínűséget* az összes lehetséges helyre mint kezdeti állapotra átlagolva, ekkor

$$\bar{\pi}(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \pi_{j,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\alpha_{j,j}(t)|^2. \quad (1.24)$$

Vezessük be továbbá az

$$\bar{\alpha}(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \alpha_{j,j}(t) \quad (1.25)$$

átlagos visszatérési amplitúdót (*average return amplitude*) [18, 89, 90]. Ez a mennyiség az átlagos visszatérési valószínűségre egy alsó korlátot ad, ugyanis a Cauchy-Schwartz egyenlőtlenséget [91] felhasználva

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\alpha_{j,j}(t)|^2 \geq \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \alpha_{j,j}(t) \right|^2 = |\bar{\alpha}(t)|^2. \quad (1.26)$$

Miért van szükségünk erre az új mennyiségre? A klasszikus esetben láttuk, hogy a $\bar{p}(t)$ átlagos visszatérési valószínűség csak a sajátértékektől függött, ezt a hasznos tulajdonságot szeretnénk átörökíteni valamilyen formában a kvantumos esetre is. Az átlagos visszatérési amplitúdó definíciója szerint

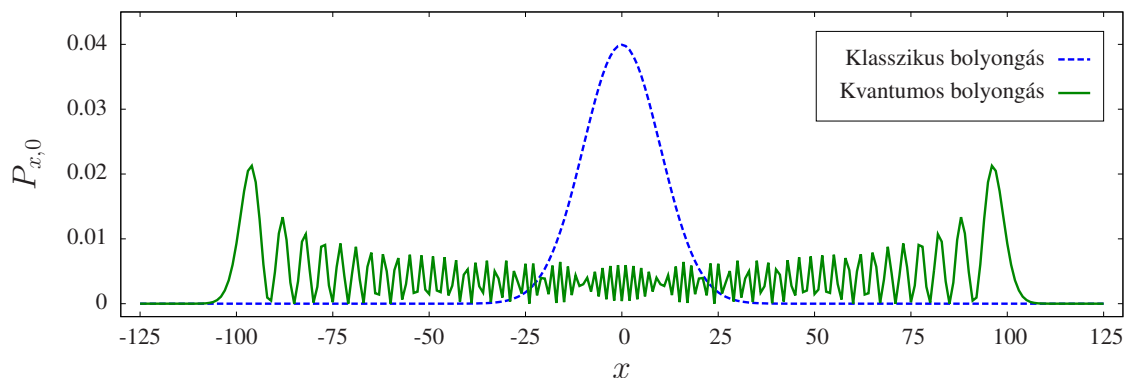
$$\bar{\alpha}(t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \alpha_{j,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-iE_n t} \langle \phi_n | \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j| \phi_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-iE_n t}. \quad (1.27)$$

Láthatjuk, hogy ez a mennyiség már csak a sajátértékektől függ, hasonlóan a klasszikus esethez. Ezen a ponton ismét betekintést kaphatunk a klasszikus és kvantumos bolyongások közti különbségekbe. A klasszikus esetben láttuk, hogy mivel a Laplace-mátrix legkisebb sajátértéke $\lambda_{\min} = 0$, ezért elég idő elteltével $\bar{p}(t)$ az $1/N$ értékhez tart. Ugyanolyan gráfot véve, a klasszikus és kvantumos bolyongásokra a \mathbf{T} mátrix és a \hat{H} Hamilton-operátor mátrix reprezentációja a Hilbert-tér egy ortonormált bázisán megegyezik, azaz $\lambda_n = E_n$ minden n -re. Az (1.15) klasszikus átlagos visszatérési valószínűség és az (1.27) kvantumos átlagos visszatérési amplitúdó esetén tehát a sajátértékek megegyeznek, az egyetlen különbség a két formula között, hogy $\bar{\alpha}(t)$ képletében megjelenik a komplex egység az exponenciális kitevőjében, ebben akár a kvantumos világra jellemző hullámszerű viselkedést is felismerhetjük. Ez a látszólag kis különbség alapvetően meg tudja változtatni a rendszer tulajdonságait, például a rendszer

dinamikáját periodikussá teheti.

Példa

Az 1.1 ábrán egy 251 csúcsot tartalmazó láncon (ld. 2.1 ábra) történő folytonos idejű klasszikus illetve kvantumos bolyongás valószínűségeloszlása látható, a kezdeti állapot a középső csúcs volt. Látható, hogy $t = 50$ időegység múlva milyen valószínűséggel találjuk a bolyongót a különböző helyeken. A $P_{x,0}$ valószínűségeket a klasszikus esetre az (1.11) míg a kvantumos esetben az (1.21) formulával számítottuk ki. Az ábrán jól látható, hogy merőben más a két rendszer dinamikája. A klasszikus bolyongás a kezdeti egy pontra koncentrált eloszlásból az idő elteltével tart az $1/N$ egyensúlyi eloszláshoz, azaz a görbe minden oszcilláció nélkül egyszerűen „ellaposodik”. A kvantumos esetben sokkal gyorsabb a terjedés is, valamint gazdagabb a dinamika is: megjelennek oszcillációk a rendszerben, és a hosszú idő utáni végállapot sem írható fel olyan egyszerűen mint a klasszikus esetben. A következő fejezetekben számos példát fogunk látni arra, hogyan tér el a klasszikus bolyongástól a kvantumos megfelelője.



1.1. ábra. Valószínűségeloszlás a klasszikus illetve a kvantumos bolyongás esetén egy 251 állapotot tartalmazó láncon. A kezdeti állapot a 0 indexszel jelzett középső pont volt, az időtartam amit vizsgálunk pedig $t = 50$ időegység. Mindkét eloszlás diszkrét helyekhez tartozik, bár a jobb láthatóság miatt az adatokat folytonos vonallal ábrázoltuk.

2. fejezet

Folytonos idejű kvantumos bolyongás dinamikusan perkolált gráfokon

Ebben a fejezetben dinamikusan perkolált gráfokon történő folytonos idejű kvantumos bolyongás tulajdonságait mutatjuk be abban az esetben, amikor a gráf két egymást követő megváltozása közötti időtartam nagyon kicsi [1].

2.1. Irodalmi áttekintés

Mint korábban láttuk, a kvantumos bolyongások esetén a hullámfüggvény segítségével determinisztikusan le tudjuk írni a rendszer állapotát, a klasszikus értelemben vett véletlenszerűség nem játszik szerepet mindaddig, amíg valamilyen módon meg nem zavarjuk a rendszert, például megmérve azt, hogy melyik állapotban van éppen a bolyongó. A rendszer időfejlődését azonban más módon is megzavarhatjuk. Mint láttuk, a bolyongás leírásához szükségünk van egy gráfra, mely előírja, hogy mely állapotokból mely állapotokba juthat el a bolyongó. Mérés helyett ez a gráf is megváltozhat fizikai rendszertől függően, például külső zaj hatására. A klasszikus bolyongások irodalmában a véletlen gráfokon történő bolyongás mára kiterjedt irodalommal rendelkezik [4].

A legegyszerűbb eset, amikor kezdetben extra éleket adunk a gráfhoz, majd megnézzük, ezek mennyire befolyásolják a bolyongás dinamikáját [19, 65, 89]. Azt, hogy milyen éleket adunk hozzá a gráfhoz, vagy mely éleket vesszük ki a dinamika indulása előtt, akár véletlenszerűen is megválaszthatjuk. A véletlen gráfok matematikai leírásával többek között Erdős Pál és Rényi Alfréd matematikusok is foglalkoztak [92–94]. Mára a véletlen gráfok matematikai leírá-

sa kiterjedt szakirodalommal rendelkezik [95–97], mely annak is köszönhető, hogy a komplex hálózatok leírásában is sikeresen alkalmaznak ilyen modelleket [98–100].

A véletlen gráfok elméletével egy időben született meg a *perkoláció* elmélete is, amely szintén véletlen gráfokkal foglalkozik [101]. Ebben a modellben éleket (*bond percolation*) vagy csúcsokat (*site percolation*) egymástól függetlenül, egy adott valószínűség szerint elhagyunk a rendszerből, például egy négyzetrácsból [102]. A perkolációs modelleket a matematika és fizika tudományában széles körben használják a járványok terjedésének leírásától a folyadékok porózus közegekben való terjedéséig [103]. Amennyiben az időfejlődés során a gráf nem változik *statikus perkolációról* beszélünk, míg ha a dinamika során is megváltozhat a gráf akkor azt *dinamikus perkolációnak* nevezzük [20].

A statikus perkoláció esetén a bolyongás időfejlődése előtt veszünk egy perkolált gráfot, majd ezen indítjuk el a bolyongást, a dinamika során pedig a gráf változatlan marad. Egy mennyiség sokaság átlagát ebben a modellben megkaphatjuk úgy, hogy az összes lehetséges gráfra átlagolunk. A folytonos idejű kvantumos bolyongások esetén ezt a kérdéskört többen is vizsgálták véletlen gráfok és statikus perkoláció esetén [65, 89, 104–106].

A diszkrét idejű kvantumos bolyongások tulajdonságait szintén vizsgálták perkolált gráfokon [107], ahol a perkoláció miatt például a bolyongás transzport tulajdonságait erősen megváltoztatja az Anderson-lokalizáció [108]. Dinamikusan perkolált gráfokon történő diszkrét idejű kvantumos bolyongásokban lehetnek olyan aszimptotikus állapotok, melyek nem időfüggetlen egyensúlyi eloszlást mutatnak, hanem időfüggő oszcillációk lépnek fel [25–27]. A folytonos idejű kvantumos bolyongás esetén a perkoláció hatását legjobb tudomásom szerint előttem nem vizsgálták.

2.2. A véletlen unitér dinamika analitikus leírása

2.2.1. Egy rendszer időfejlődése

Ebben a fejezetben azt vizsgálom meg, hogyan változik a bolyongás dinamikája, ha a gráfot, amin a bolyongás történik, az időfejlődés során, azaz dinamikusan változtatom. A diszkrét idejű esetben már vizsgáltak ilyen rendszereket [25–27], a most következő modell azonban ettől eltérő. A diszkrét esetben azt találták, hogy sok rögzített időtartamú lépés, azaz hosszú idő után a rendszer végállapota nem a várt átlagolt dinamikát mutatja, hanem maradhat koherencia

a rendszerben. Az általam vizsgált modellben a sok lépést véges időtartam alatt hajtjuk végre, mivel a folytonos dinamikából adódóan bármikor megváltoztathatjuk a gráfot, amit a diszkrét esetben nem tehetünk meg.

Tegyük fel, hogy a gráf, amin a bolyongás történik N élet tartalmaz, melyek egy adott kezdeti elrendezés szerint vannak összekötve (például egy lánc). Ezek után adott τ időközönként véletlenszerűen megváltoztatjuk a gráfot. Egy lépés során egy adott élet λ valószínűséggel megtartunk, $1 - \lambda$ valószínűséggel pedig elveszünk, majd ezt egymástól függetlenül az eredeti gráf összes élére megteesszük, azaz minden lépés során a gráf generálása független attól, hogy a korábbi lépésben mely élek voltak jelen. Fejlesszük ilyen módon a rendszert T ideig $S = T/\tau$ lépésben.

Mivel a rendszernek N éle van, így az összes realizáció száma $R = 2^N$. Minden egyes realizációban másképp vannak összekötve a csúcsok, így minden ilyen gráfhoz tartozik egy saját Hamilton-operátor az (1.16) definíció alapján. Két lépés között a rendszer unitér módon fejlődik, melyet az

$$\hat{U}_r(\tau) = e^{-i\hat{H}_r\tau} \quad (2.1)$$

unitér operátorokkal írhatunk le, ahol $r = 1 \dots R$ az egyes realizációkat indexeli.

Tegyük fel, hogy a rendszer kezdeti állapota $|\psi(0)\rangle$ volt. Minden egyes lépésben hatunk a rendszeren az egyik $\hat{U}_r(\tau)$ operátorral, ezért vezessük be a következő jelölést: legyen $\hat{U}_r^{(s)}(\tau)$ az s -edik lépésben ható unitér operátor. Így a rendszer állapota a T időpontban a következő módon írható

$$|\psi(T)\rangle = \hat{U}_r^{(S)}(\tau) \dots \hat{U}_r^{(2)}(\tau) \hat{U}_r^{(1)}(\tau) |\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}_r^{(S)}\tau} \dots e^{-i\hat{H}_r^{(2)}\tau} e^{-i\hat{H}_r^{(1)}\tau} |\psi(0)\rangle. \quad (2.2)$$

A fenti szorzatban a \hat{H}_r operátorok nem kommutálnak egymással, de a szorzatok kiértékeléséhez használhatjuk a Zassenhaus-formulát, mely szerint

$$\begin{aligned} e^{t(A+B)} &= e^{tA} e^{tB} \prod_{j=2}^q e^{t^j C_j^{(A,B)}} + \mathcal{O}(t^{q+1}), \\ \lim_{n \rightarrow \infty} e^{tA_1} e^{tA_2} \dots e^{tA_p} e^{t^2 C_2^{\{A_j\}}} \dots e^{t^n C_n^{\{A_j\}}} &= e^{t \sum_{j=1}^p A_j}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

ahol $C_j^{(A,B)}$, $C_n^{\{A_j\}}$ a Zassenhaus-exponensek [109, 110]. A későbbiekben a gyorsan változó esetet, azaz matematikailag a $\tau \rightarrow 0$ határesetet fogjuk vizsgálni, ezért a magasabb rendű tagokat elhagyhatjuk, így

$$e^{-i\hat{H}_r^{(p)}\tau} e^{-i\hat{H}_r^{(q)}\tau} = e^{-i\tau(\hat{H}_r^{(p)} + \hat{H}_r^{(q)})} + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (2.4)$$

Ebben a modellben tehát, ha a τ lépésköz kellően kicsi, akkor a rendszer állapota a következőképpen írható,

$$|\psi(T)\rangle = \left(e^{-i\tau \sum_{s=1}^S \hat{H}_r^{(s)}} + \mathcal{O}(\tau) \right) |\psi(0)\rangle . \quad (2.5)$$

Most vizsgáljuk meg az egyes realizációk valószínűségét. Egy olyan véletlen gráf valószínűsége, mely az összes élet tartalmazza az eredeti gráfból $p^{\{N\}} = \lambda^N$. Egy olyan rendszer valószínűsége, melyben $N - 1$ él található meg $p^{\{N-1\}} = \lambda^{N-1}(1 - \lambda)$, valamint ez az eset degenerált, ugyanis N módon vehetünk ki egy életet. Ezen gondolatmenettel belátható, hogy egy olyan realizáció valószínűsége, melyben k él található $p^{\{k\}} = \lambda^k(1 - \lambda)^{N-k}$, a degeneráltsága pedig $\binom{N}{k}$.

A Hamilton-operátorokat reprezentálhatjuk mátrixokkal, ekkor minden \mathbf{H}_r mátrix felbontható

$$\mathbf{H}_r = \sum_{k \in \mathcal{E}_r} \mathbf{E}_k \quad (2.6)$$

módon, ahol \mathcal{E}_r azon élek halmaza, melyek megtalálhatóak az adott realizációban, \mathbf{E}_k pedig egy adott élhez tartozó mátrix. Például, ha a \mathbf{H}_r realizáció az első és a második élet tartalmazza, akkor $\mathbf{H}_r = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$, a perkoláció nélküli eredeti gráfra pedig

$$\mathbf{H} = \sum_{k=1}^N \mathbf{E}_k . \quad (2.7)$$

A feladatunk az, hogy a (2.5) egyenletben a kitevőben szereplő

$$\mathbf{S} = \sum_{s=1}^S \mathbf{H}_r^{(s)} \quad (2.8)$$

összeget kiértékeljük. Ha a lépések száma, S nagyobb a realizációk R számánál, akkor néhány \mathbf{H}_r mátrix többször is elő fog fordulni az \mathbf{S} összegben. Annak a valószínűsége, hogy egy adott \mathbf{H}_r mátrix hányszor szerepel \mathbf{S} -ben binomiális eloszlást követ. Ha $S \gg R$, akkor használhatjuk a nagy számok törvényét: egy adott \mathbf{H}_r mátrix gyakoriságát megbecsülhetjük $p_r S + \mathcal{O}(\sqrt{S})$ módon, ahol p_r a \mathbf{H}_r mátrixhoz tartozó gráf előfordulási valószínűsége. Becslésünk pontosságát a binomiális eloszláshoz tartozó $\sqrt{S p_r (1 - p_r)}$ szórásból származtattuk, így kaptuk az $\mathcal{O}(\sqrt{S})$ hibát. Ha az adott realizáció k élet tartalmaz, akkor $p_r = p^{\{k\}}$.

Most vizsgáljuk meg, hogy egy adott \mathbf{E}_k mátrix hányszor fordul elő az \mathbf{S} összegben. Ez a mátrix a gráf egy adott k éléhez tartozik. E mellé válasszunk j darab másik életet, ahol $j = 0 \dots N - 1$. Ezt $\binom{N-1}{j}$ módon tehetjük meg, tehát $\binom{N-1}{j}$ olyan gráf van amiben $j + 1$ él

található, és az egyik ezek közül a szóban forgó k -val jelölt él. Egy olyan mátrix, amiben $j + 1$ él van $p^{\{j+1\}}S + \mathcal{O}(\sqrt{S})$ alkalommal fordul elő az \mathbf{S} szummában, így ki tudjuk számolni az \mathbf{E}_k mátrix előfordulásának számát, mely

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} \binom{N-1}{j} \left[p^{\{j+1\}}S + \mathcal{O}(\sqrt{S}) \right] &= \\ = S \sum_{j=0}^{N-1} \binom{N-1}{j} \lambda^{j+1} (1-\lambda)^{N-j-1} + 2^{N-1} \mathcal{O}(\sqrt{S}) &= S\lambda + \mathcal{O}(\sqrt{S}). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ez a formula bármelyik élre igaz, így a vizsgált összeg az alábbi alakra egyszerűsödik a (2.7) összefüggés felhasználásával:

$$\mathbf{S} = \sum_{s=1}^S \mathbf{H}_r^{(s)} = \left[S\lambda + \mathcal{O}(\sqrt{S}) \right] \mathbf{H}. \quad (2.10)$$

Az egyes realizációkban szereplő mátrixok összege a fenti levezetés szerint közelíthető oly módon, hogy az eredeti gráfhoz tartozó mátrixot megszorozzuk az egy él megtartását jellemző λ valószínűséggel, és az így kapott skálázott mátrixot vesszük annyiszor, ahány tagú az összeg. Ez megfelel egy olyan képnek, hogy sok lépés után a rendszerben bevezetett véletlenszerűség kiátlagolódik, mégpedig úgy, hogy minden él, azaz az állapotok közötti csatolás „erőssége” effektíven λ -szorosára változik. Akár használhatnánk ezt az eredményt is végső konklúzióként, azonban mivel az adott gráfon történő bolyongás jellemző tulajdonságait, például az átmeneti valószínűségeket az idő függvényében szokás megadni, ezért nézzük meg ez az átskálázás hogyan jelentkezik az időfejlődésben.

A $|\psi(T)\rangle$ kvantumállapot időfejlődését leíró (2.5) egyenletben szereplő kitevő a fenti eredményeink felhasználásával

$$-i\tau \sum_{s=1}^S \hat{H}_r^{(s)} = -iT\hat{H} (\lambda + \mathcal{O}(\sqrt{\tau})) \quad (2.11)$$

módon írható. Véve a $\tau \rightarrow 0$ határesetet,

$$|\psi(T)\rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \prod_{k=1}^{\frac{T}{\tau}} \hat{U}_r^{(k)}(\tau) |\psi(0)\rangle = \hat{U}(T\lambda) |\psi(0)\rangle, \quad (2.12)$$

azaz ebben a határesetben a perkoláció azt eredményezi, hogy a rendszer időfejlődése ugyanolyan alakú lesz mint a nem perkolált esetben, csupán az időt kell átskálázni a perkolációt jellemző λ valószínűséggel. A kapott formula egyszerűen és szemléletesen visszaadja a két

határesetet is, nevezetesen amikor $\lambda = 1$ illetve 0 . Az első esetben nincs perkoláció, megkapjuk a tiszta, zavartalan unitér időfejlődést, míg a második esetben egyáltalán nincsenek élek a rendszerben, így a rendszer örökre a kezdeti állapotban marad, az időfejlődés ebben az esetben egyszerűen az egységoperátornak felel meg.

2.2.2. Szuperoperátor formalizmus

Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk meg, hogy sok, kezdetben azonos, perkolált rendszeren történő átlagolás mit eredményez. Pontosabban, hogy az összes lehetséges trajektóriára vett átlagolás után a korábban bemutatott gyors perkoláció mit okoz.

Egy tetszőleges mennyiség átlagát a sokaságra a szokásos

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\mathfrak{T}} \sum_{t=1}^{\mathfrak{T}} [\dots]_t = \sum_{t=1}^{\mathfrak{T}} p_t [\dots]_t, \quad (2.13)$$

módon számolhatjuk ki, ahol \mathfrak{T} az összes lehetséges trajektória száma, t pedig az egyes trajektóriákat indexeli [18]. A vizsgált perkolált rendszerben minden lépésben λ valószínűséggel megtartunk egy életet, vagy $1 - \lambda$ valószínűséggel eldobjuk. Vizsgáljunk egy N élet tartalmazó rendszert, ekkor az összes lehetséges gráf száma $R = 2^N$. A rendszert τ időközönként megváltoztatjuk, azaz T nagyságú időtartamot véve a lehetséges trajektóriák száma $\mathfrak{T} = (2^N)^{(T/\tau)}$, hiszen minden lépésben R gráf közül választhatunk. Nagy rendszerekre minden egyes trajektória egyenként való kiértékelése igen bonyolult feladat, ugyanis például egy $N = 15$ élet tartalmazó rendszert $S = 5000$ lépéssel fejlesztve a lehetséges trajektóriák száma nagyobb mint 10^{22577} . A szuperoperátorok segítségével azonban ilyen rendszert egy asztali számítógéppel is tudunk vizsgálni, mint ahogy azt a későbbi, numerikus példákat tartalmazó 2.3 fejezetben bemutatunk.

Az átlagolást úgy is történhet, hogy minden lépésben hattatjuk a

$$\hat{\phi}_\tau(\hat{\rho}) = \sum_{r=1}^R p_r \hat{U}_r(\tau) \hat{\rho} \hat{U}_r^\dagger(\tau) \quad (2.14)$$

szuperoperátort [111–113], ahol $\hat{U}_r(\tau)$ és p_r megegyeznek a korábban bevezetett, egy adott véletlen gráfhoz tartozó unitér operátorral, illetve valószínűséggel, $\hat{\rho}(t)$ pedig a rendszer sűrűségoperátora. Ha $S = T/\tau$ lépést nézünk, akkor az átlagolt állapotot

$$\hat{\rho}(T) = \overbrace{\hat{\phi}_\tau(\hat{\phi}_\tau(\hat{\phi}_\tau(\dots \hat{\phi}_\tau(\hat{\rho})))}^S = \phi_\tau^{(S)}(\hat{\rho}(0)) \quad (2.15)$$

módon írhatjuk. Ha felhasználjuk az $\hat{U}_r(\tau)$ operátor (2.1) definícióját, akkor a fenti kifejezést

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(T) &= \sum_{r_S=1}^R p_{r_S} \hat{U}_{r_S}(\tau) \left(\sum_{r_{S-1}=1}^R p_{r_{S-1}} \hat{U}_{r_{S-1}}(\tau) \left(\dots \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \dots \sum_{r_1=1}^R p_{r_1} \hat{U}_{r_1}(\tau) \hat{\rho}(0) \hat{U}_{r_1}^\dagger(\tau) \dots \right) \hat{U}_{r_{S-1}}^\dagger(\tau) \right) \hat{U}_{r_S}^\dagger(\tau) = \\ &= \sum_{r_1 \dots r_S=1}^R p_{r_1} \dots p_{r_S} e^{-i\hat{H}_{r_S}\tau} \dots e^{-i\hat{H}_{r_1}\tau} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}_{r_1}\tau} \dots e^{i\hat{H}_{r_S}\tau}\end{aligned}\quad (2.16)$$

alakban írhatjuk. Ismét a $\tau \rightarrow 0$ határesetet vizsgáljuk. A fenti egyenlet utolsó során láthatjuk, hogy ugyanolyan operátor szorzatot kell kiértékelni, mint egy rendszer esetén, így az ott alkalmazott módszerek itt is felhasználhatóak, azaz az átlagot véve a perkoláció az idő átskálázásában jelentkezik, tehát

$$\hat{\rho}(T) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \hat{\phi}_\tau^{(\frac{T}{\tau})}(\hat{\rho}(0)) = \hat{U}(T\lambda) \hat{\rho}(0) \hat{U}^\dagger(T\lambda). \quad (2.17)$$

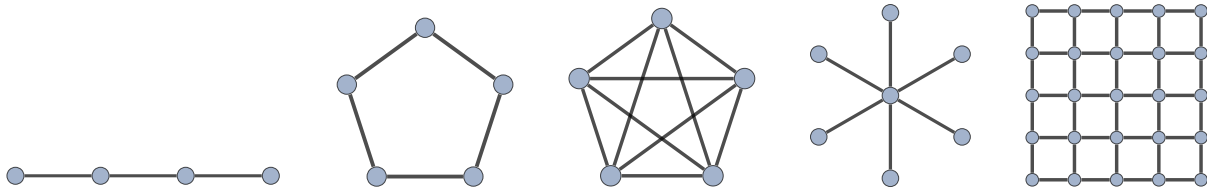
Klasszikus rendszerekre a fentivel analóg gondolatmenet alkalmazható, klasszikusan is a gyors perkoláció az idő átskálázásában jelentkezik. Van azonban egy lényeges különbség a klasszikus és a kvantumos rendszerek között: a kvantumos rendszerek sokkal érzékenyebbek a τ lépésköz megválasztására, valamint a rendszer későbbi dinamikáját is erőteljesen befolyásolja a perkolált gráf. Ezt mutatjuk be a következő fejezetben néhány numerikus példán keresztül.

2.3. Numerikus eredmények

Ebben a fejezetben példákat mutatunk az analitikus eredményekre, valamint megvizsgáljuk az általunk felállított modell érvényességi tartományát, valamint azt, hogy mi történik a rendszerekkel a modell kereteiből kilépve. Az előző fejezetbeli levezetés során a $\tau \rightarrow 0$ határesetet vettük, mely közelítés matematikailag lehet egzakt, egy valós fizikai rendszerben azonban hasznos lehet megvizsgálni, mi történik kicsi, de véges idejű lépésköz esetén. Itt a korábban bemutatott klasszikus, illetve kvantumos rendszerekre vett (1.12) illetve (1.22) visszatérési valószínűségeket fogjuk főként vizsgálni, mivel ezek a mennyiségek az adott gráfra jellemzőek, és jól tükrözik a bolyongás lényeges tulajdonságait.

A tanulmányozott rendszereket bemutató gráfok a 2.1 ábrán láthatóak. Ebben a fejezetben ilyen struktúrájú gráfokat fogunk használni, mivel ezekre a rajtuk történő bolyongás dinamikája analitikusan is egyszerű függvényekkel írható le, így nagyon jó viszonyítási alapot adnak az idő

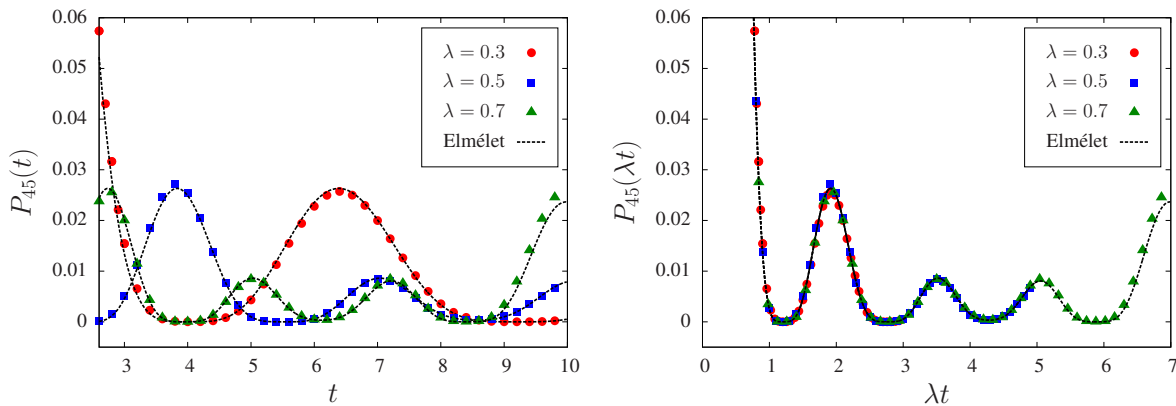
átskálzásának tanulmányozásához.



2.1. ábra. Példák a numerikus példákban szereplő rendszerekre. Az ábrák sorrendjében balról jobbra: 4 csúcsból álló lánc, 5 csúcsú gyűrű, 5 csúcsot tartalmazó teljes gráf, 7 csúcsú csillag gráf, valamint végezetül egy 5×5 -ös négyzetes rács.

2.3.1. Analitikus eredmények szemléltetése

Egy trajektória kétdimenziós négyzetes rácson

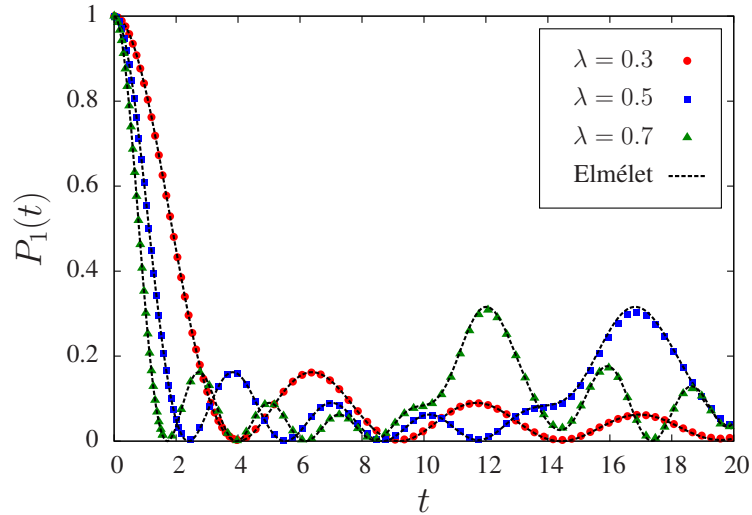


2.2. ábra. *Bal oldali ábra:* Egy 10×10 -es négyzetes rácson, $S = 10^5$ lépés után az idő függvényében a 45-ös indexszel jelzett középső rácspontba való visszatérési valószínűség numerikusan, illetve analitikusan a (2.12) egyenlet hullámfüggvényét felhasználva. A különböző görbék különböző λ valószínűséghez tartoznak. *Jobb oldali ábra:* A bal oldali ábrán szereplő adatok a λ valószínűséggel átskálázott idő függvényében ábrázolva.

A 2.2 ábrán egy $N = 100$ csúcsot tartalmazó perkolált kétdimenziós (2D) négyzetes rácson tanulmányozhatjuk a bolyongást. A rendszert $\tau = 10^{-4}$ lépésközzel fejlesztettük $S = 10^5$ lépésben, tehát a vizsgált időtartam a $[0, 10]$ intervallum volt. A korábbi definíciónak megfelelően, minden lépésben véletlenszerűen, a λ valószínűséggel jellemzetten generáltunk egy gráfot, meghatároztuk az ehhez a konfigurációhoz tartozó \mathbf{H}_r mátrixot, a rendszert pedig az ebből származtatott \mathbf{U}_r mátrixszal reprezentált unitér operátorral fejlesztettük. Ezzel a módszerrel numerikusan a (2.2) egyenletben leírt állapotot állítottuk elő. A rendszert a $|\psi(0)\rangle = |45\rangle$ állapotból indítottuk, ez a középső rácspontot jelöli, és az ebbe a pontba való (1.22) visszatérési valószínűséget számítottuk ki mind numerikusan, mind pedig analitikusan a (2.12) egyenlet segítségével.

Különböző λ értékeket vettünk, és láthatjuk, hogy a görbék valóban ugyanolyan alakúak, csak skálázódtak a λ valószínűségnek megfelelően, valamint nagyon jól egyezik a szimuláció az elméleti értékekkel.

Szuperoperátor formalizmus gyűrűn



2.3. ábra. Visszatérési valószínűség az idő függvényében egy $N = 15$ pontból álló gyűrűn. A szuperoperátor formalizmust használtuk, a szimulációban $S = 5000$ lépést vettünk $\tau = 0.004$ lépésközzel. A (2.17) egyenlet felhasználásával kapott analitikus értékeket szaggatott vonallal jelöltük. A különböző görbék különböző λ valószínűséghez tartoznak.

A 2.3 ábrán azt mutatjuk be, hogy a szuperoperátor formalizmus is nagyon jó modellnek bizonyul véges lépésköz használatával. A szimulációhoz egy $N = 15$ csúcsot tartalmazó gyűrűt használtunk, melyet $\tau = 0.004$ lépésközzel $S = 5000$ lépésben fejlesztettünk. A kezdeti sűrűségmátrix $\hat{\rho}(0) = |1\rangle\langle 1|$ alakú volt. A programban formailag a (2.15) egyenletet valósítottuk meg. Az átlagolásnak persze van itt is egy hátránya, ugyanis 2^N darab mátrixot használunk fel az átlag elvégzéséhez, ennyi realizáció van. Emiatt átlagos asztali számítógépeken csak aránylag kis rendszereket tudunk modellezni. A szuperoperátor formalizmus azonban még így is nagy segítséget jelent a szokásos, összes trajektóriára vett átlagolással szemben, mint ahogy azt korábban már bemutattuk. A 2.3 ábra jól mutatja, hogy elméleti számolásunk megfelelő paramétereket választva nagy pontossággal alkalmazható, a numerikus és az elméleti görbék szépen fedik egymást a különböző λ perkolációs valószínűségekre.

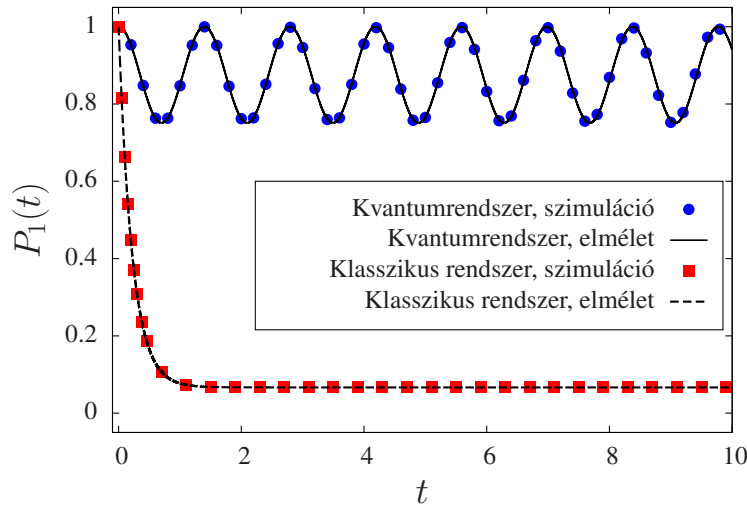
Ezen a ponton szánjunk pár szót a görbék alakjára is. Egy N pontból álló gyűrű lehet a modellje a végtelen egyenesnek is, ha az $N \rightarrow \infty$ végtelen határesetet nézzük. Ekkor az origóba

való visszatérés

$$P_0(t) = J_0^2(2t) \quad (2.18)$$

alakú [13], ahol $J_0(t)$ az elsőfajú nulladrendű Bessel-függvényt jelöli. Véges rendszeren a visszatérési valószínűség nem tarthat nullához [IV], azonban általánosságban elmondható, hogy egy N csúcsot tartalmazó gyűrűn $t \approx N/2$ ideig a Bessel-függvényhez hasonló lecsengést láthatunk, majd ezután jelentkeznek a véges méretből adódó hatások. Ez a viselkedés átskálázva a fenti rendszeren is megfigyelhető, ebből arra következtethetünk, hogy eredményeink végtelen rendszerre is alkalmazhatóak.

Egy trajektória teljes gráfon



2.4. ábra. A klasszikus és a kvantumos bolyongás esetén a visszatérési valószínűség összehasonlítása egy $N = 15$ pontból álló teljes gráfon. A rendszert $S = 10^5$ lépésben fejlesztettük $\tau = 10^{-4}$ lépésközzel, a perkolációt jellemző λ valószínűség értékét pedig $\lambda = 0.3$ -nak választottuk. Az elméleti görbékhez a (2.12) egyenletet használtuk.

Harmadik példánkban $N = 15$ állapot között az összes lehetséges átmenetet megengedtük, vagyis a bolyongás gráfja egy teljes gráf. Ez a megfontolás úgy is értelmezhető, hogy nem köztünk ki semmilyen kezdeti gráfot, így ez egy általános esetnek tekinthető. Ez a rendszer az időfejlődése miatt érdekes, ami egyébként megegyezik a csillag gráfon tapasztalt terjedéssel, ha a kezdőállapot a gráf középső csúcsa [114, 115]. De miért is különleges a bolyongás dinamikája ezen a gráfon? A klasszikus bolyongások tárgyalásánál láttuk, hogy a kezdőállapotban való megtalálás valószínűsége rendszertől függetlenül az $1/N$ egyensúlyi értékhez tart, erre a

rendszerre konkrétan

$$P_0^c(t) = \frac{1}{N} \left((N-1) e^{-Nt} + 1 \right) \quad (2.19)$$

függvény szerint [II]. Ha nem csak az idővel, hanem a rendszer méretével is a végtelenbe tartunk, akkor $P_0^c(t)$ nullához tart. A bolyongás kvantumos megfelelőjét véve a visszatérési valószínűsége az azt kapjuk, hogy

$$P_0(t) = \frac{(N-1)^2}{N^2} + \frac{1}{N^2} + 2 \frac{N-1}{N^2} \cos(Nt), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} P_0(t) = 1, \quad (2.20)$$

azaz hiába engedünk meg minden lehetséges átmenetet nagyon sok (akár végtelen sok) állapot között, és hiába várunk nagyon sokáig (akár örökké), a rendszer alig (sőt akár egyáltalán nem) megy el az indulás helyéről, köszönhetően a bolyongó kvantumos mivoltának, és az interferenciának, mely a rendszer szimmetriájából ered.

A 2.4 ábrán azt vizsgáltuk meg, hogy hogyan befolyásolja a perkoláció ezt a jelenséget, megmarad-e ez az erős lokalizáció a kvantumos rendszerben, hiszen a perkoláció elrontja a gráf erős szimmetriáját. Az ábrán jól látható, hogy a numerikus és elméleti görbék tökéletesen fedik egymást, az átskálázott dinamika jól írja le a rendszert, és a perkolációból eredő zaj sem rontja le számottevően a modellünket, míg a klasszikus rendszer lassabban ugyan mint perkoláció nélkül, de tart az egyensúlyi értékhez.

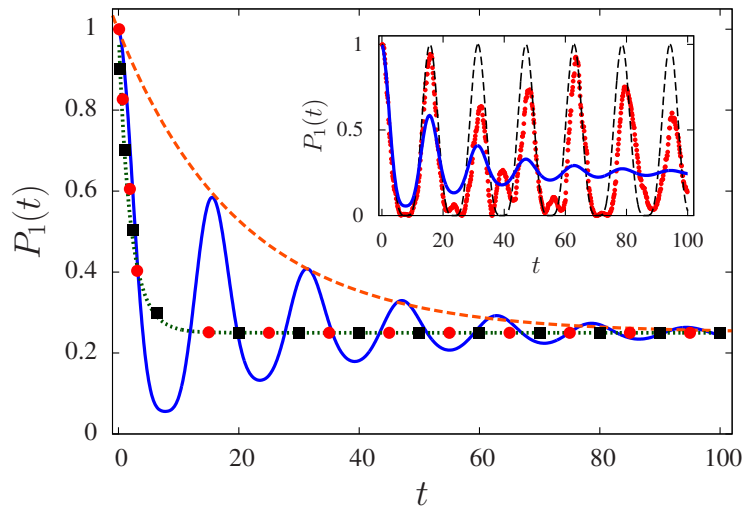
2.3.2. Véges lépésköz vizsgálata

A korábbi példákban azt szemléltettük, hogy az általunk felállított modell nemcsak az egzakt matematikai határesetben, de numerikus szimulációk során is alkalmas a rendszer leírására. Ebben a fejezetben még tovább megyünk, és megnézzük, hol van az a határ, amikor az elmélet a benne használt közelítések miatt már nem ad pontos eredményt, és hogy hogyan viselkedik a rendszer a modell érvényességi tartományán kívül.

Elsőként egy $N = 4$ csúcsból álló perkolált gyűrűn tanulmányoztuk mind a klasszikus, mind pedig a kvantumos bolyongás dinamikáját, a perkolációt jellemző valószínűséget pedig $\lambda = 0.2$ -nek választottuk meg. A kezdeti állapotnak a $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ állapotot választottuk, és ismét az origóba való visszatérés valószínűségét számítottuk ki, mely az (1.22) és (2.5) formulák alapján a kvantumos rendszerre

$$P_1(t) = \cos(\lambda t)^4 \quad (2.21)$$

alakú. Részben ez az időfejlődés indokolta a rendszer megválasztását, mivel ez egy periodikus



2.5. ábra. Annak a valószínűsége, hogy a bolyongót az indulás helyén mérjük egy $N = 4$ csúcsot tartalmazó perkolált gyűrűn. A perkolációt leíró valószínűséget $\lambda = 0.2$ -nek választottuk. **Kis ábra:** szaggatott vonal: elméleti görbe a (2.12) egyenlet felhasználásával. Pontok: egy kvantum trajektória $S = 3000$ lépés használatával. Folytonos görbe: a (2.17) szuperoperátor formalizmus felhasználásával $S = 1000$ lépést véve. **Fő ábra:** Folytonos görbe: megegyezik a kis ábrán lévővel, a szaggatott vonal pedig a burkolója. Pontozott vonal: az elméleti visszatérési valószínűség klasszikus rendszeren. Körök: egy klasszikus trajektória $S = 1000$ lépéssel. Négyzetek: szuperoperátor formalizmus klasszikus rendszeren $S = 1000$ lépést véve.

függvény, és tetszőleges idő múlva is teljes visszatérést tapasztalunk, azaz van olyan időpillanat, amikor a rendszer 1 valószínűséggel az indulás helyén van. Ennek az elméleti görbének a grafikonja látható a 2.5 ábra kis ábráján szaggatott vonallal. Ugyanitt pontokkal ábrázoltuk az az esetet, amikor egy rendszer időfejlődését néztük, azaz egy trajektóriát vettünk a perkolált gráfon. Ebben a szimulációban $S = 3000$ lépésben $T = 100$ időegységig fejlesztettük a rendszert. Az ábrán jól látható, hogy a szimuláció indítása után egy ideig továbbra is illeszkedik a numerikus eredmény a (2.21) elméleti görbére, az idő előrehaladtával azonban egyre jobban eltávolodik tőle. Ennek magyarázata a véges időlépés: minden trajektória kezdetben leírható az általunk bemutatott skálázott perkolációmentes dinamika segítségével, sok lépés után azonban a modell pontatlanná válik, minden egyes trajektória más és más véletlenszerű időfejlődést fog mutatni. Ez természetesen azt is jelenti, hogy a 2.5 kis ábrán bemutatott görbe nem reprodukálható, egy újabb futtatás hasonló, de más görbét adna. Annak ellenére, hogy minden egyes új futtatás új időfejlődést mutat, a numerikus eredmények meggyőzően alátámasztották, hogy az indítás helyére való visszatérés tetszőleges pontossággal meg tudja közelíteni az 1-et, azaz nem oszlik el egyenletesen a valószínűség a rendszerben hosszú idő után sem.

Az imént bemutatott különböző trajektóriákra átlagolhatunk is a szuperoperátor formaliz-

mus használatával, ekkor kapjuk a 2.5 folytonos kék színű görbével illusztrált adatsort. Ezen jól látható, hogy minden lépésben átlagolva a rendszer hosszú idő elteltével tart az $1/N$ egyensúlyi értékhez, analógiát mutatva a klasszikus rendszerekkel. Hasonló aszimptotika figyelhető meg a diszkrét idejű kvantumos bolyongások esetén is perkolált gráfokon [27], eredményeink pedig arra engednek következtetni, hogy az ott alkalmazott levezetés érvényes a folytonos idejű bolyongásokra is ha nagy τ lépésközt veszünk és hosszú ideig várunk, nem pedig a $\tau \rightarrow 0$ határesetet vesszük, ami nyilván a diszkrét idejű bolyongásoknál a folyamat definíciójából adódóan nem tehető meg.

A 2.5 ábrán ismét felrajzoltuk a kis ábrán már bemutatott szuperoperátor formalizmussal kapott $P_1(t)$ visszatérési valószínűséget folytonos kék vonallal, hogy össze tudjuk hasonlítani a klasszikus bolyongás dinamikájával. Klasszikus bolyongás esetén a visszatérési valószínűség alakja a vizsgált négy pontból álló gyűrűre

$$P_1^c(t) = 0.25 + \frac{e^{-2\lambda t}}{2} + \frac{e^{-4\lambda t}}{4}, \quad (2.22)$$

melyen látható, hogy exponenciálisan tart az $1/N$ egyensúlyi értékhez. Az ábrán látható, hogy klasszikus rendszer esetén nincs éles különbség az elméleti görbe (pontosított zöld vonal), az egy trajektórián vett időfejlődés (piros körök) és a szuperoperátorok használatával kapott dinamika (fekete négyzetek) között, mindhárom görbe az ekvipartíciós értékhez tart, szemben a kvantumos bolyongással, ahol csak az átlagolás után kaptuk ezt a viselkedést. Jól látható az is, hogy a kvantumos bolyongás esetén a rendszer sokkal lassabban tart az egyensúlyi értékhez. Az adatsorra az

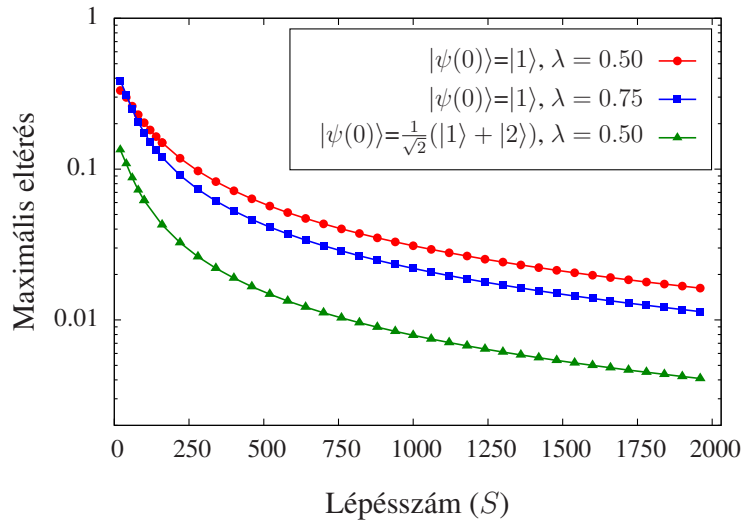
$$f(t) = a \cdot e^{-b \cdot t} + 0.25 \quad (2.23)$$

függvényt illesztve az illesztési paraméterekre azt kaptuk, hogy $a = 0.746 \pm 0.008$ és $b = 0.049 \pm 0.001$. A (2.22) egyenletbe a szimulációban használt $\lambda = 0.2$ értéket behelyettesítve azt kapjuk, hogy azonos τ lépésköz mellett a kvantumos rendszer esetén a lecsengést jellemző exponens majdnem tízszer kisebb a klasszikus esetet jellemző exponensnél.

Összefoglalva elmondhatjuk, hogy a bemutatott példák jól szemléltetik, hogy lényeges különbség van a klasszikus és a kvantumos rendszerek között. Az ismertett rendszerek azt is jól tükrözik, hogy az általunk bemutatott elméleti modell a perkolált gráfokon történő kvantumos bolyongásokra nagyobb lépésközt véve az időfejlődés kezdeti szakaszát jól írja le, azonban a kvantumos rendszerek nagyon érzékenyek a τ lépésköz megválasztására. A következő alponthan ezt a tulajdonságukat vizsgáljuk meg alaposabban.

2.3.3. Az időfelbontás finomítása

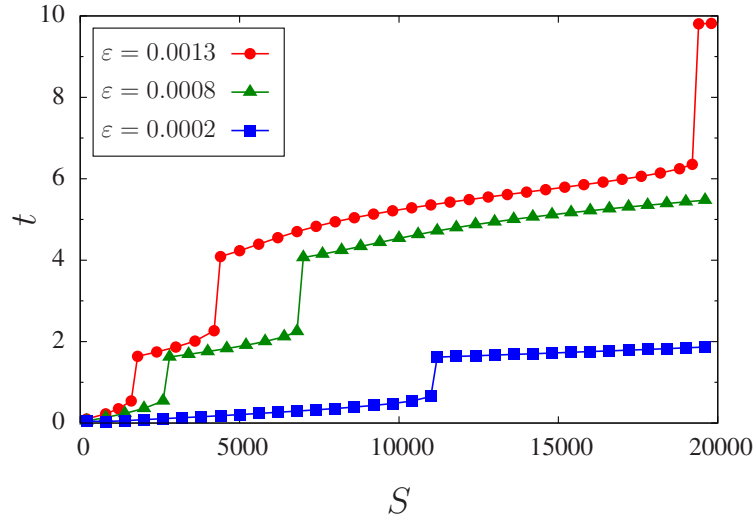
Az előző részben láttuk, hogy a τ lépésköz megválasztásával óvatosnak kell lennünk, ugyanis ez döntően befolyásolja az általunk felállított modell érvényességi tartományát. Ebben a pontban azt vizsgáljuk meg, hogy hogyan függ az elméleti modelltől való eltérés mértéke a lépésköz nagyságától.



2.6. ábra. A maximális eltérés a visszatérési valószínűségben a numerikus szimuláció és a (2.17) egyenlet segítségével meghatározott elméleti értékek között egy $N = 10$ csúcsot tartalmazó gyűrűn, rögzített $T = 10$ időtartamot vizsgálva különböző lépésszámot véve. A programban a szuperoperátor formalizmust használtuk, a különböző görbék pedig más λ perkolációs valószínűséghez és kezdeti állapothoz tartoznak.

Elsőként a 2.6 ábrán a rendszert $T = 10$ időegységig vizsgáltuk úgy, hogy a $[0, T]$ intervallumot S részre osztottuk, azaz S lépésben fejlesztettük a rendszert a szuperoperátorok segítségével. Ekkor természetesen a lépésköz nagysága $\tau = T/S$, azaz S növelésével közelíteniük kell a numerikus eredményeknek az elméleti modellhez. A szimulációban egy $N = 10$ csúcsból álló gyűrűt vizsgáltunk különböző kezdeti feltételekkel és λ perkolációs valószínűségekkel. Minden S lépésszáma kiszámoltuk az $|1\rangle$ kezdeti állapotba való visszatérés valószínűségét mind a (2.17) elméleti formulából, mind pedig numerikusan léptetve a rendszert. A maximális eltérést úgy kaptuk meg, hogy vettük a kétféle módon számolt visszatérési valószínűségek különbségének abszolút értékét minden egyes lépés után, és ezek közül a legnagyobbat választottuk ki. Az ábrán jól látható, hogy a különbség az analitikus és a numerikus eredmények között az S lépésszám növelésével csökken, ahogy azt el is vártuk a rendszertől.

Utolsó ábránkon ebben a fejezetben azt illusztráltuk, hogy a lépésszám függvényében mekkora időtartamig lehet leírni a rendszert az általunk bemutatott átskálázott időfejlődéssel úgy,



2.7. ábra. A maximális időtartam amíg az elméleti értékek és a numerikus szimuláció relatív hibája kisebb egy adott ε értéknél. A bolyongáshoz egy $N = 5$ csúcsot tartalmazó gyűrűt használtunk gráfnak, és a szuperoperátor formalizmussal átlagoltunk a lehetséges trajektóriákra. Az ábrán a $[0, 10]$ időintervallumot osztottuk S részre, azaz a lépésköz $\tau = 10/S$ volt. Ennek függvényében ábrázoltuk a korábban említett maximális időtartamot. Az ábrán látható ugrások a visszatérési valószínűség lokális szélsőértékeit és inflexiós pontjait tükrözik.

hogy az analitikus értékek és a numerikus szimuláció relatív hibája az adott időpontig ne legyen nagyobb egy $\varepsilon > 0$ paraméternél. Modellünkben egy $N = 5$ csúcsból álló gyűrűt használtunk, ezen indítottuk el a bolyongást a $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ állapotból és fejlesztettük a szuperoperátorok segítségével $\lambda = 0.5$ perkolációs valószínűséget használva. Az algoritmus a $[0, T]$, $T = 10$ intervallumot S részre osztotta, azaz egy lépésköz mérete $\tau = T/S$ volt. Minden egyes lépés után kiszámoltuk a $P_1(t)$ visszatérési valószínűséget mind a (2.17) formulából, mind pedig numerikusan, majd vettük a két eredmény relatív hibáját. Amennyiben a relatív eltérés nagyobb vagy egyenlő volt az ε toleranciánál, a szimulációt leállítottuk az adott S lépésszámmra, és megkaptuk, mekkora t ideig írja le az adott hibahatáron belül az analitikus modellünk a rendszert. Az így kapott eredmények a 2.7 ábrán láthatóak. A grafikonon jól látszik, hogy bármely T időtartamhoz és $\varepsilon > 0$ paraméterhez található olyan τ lépésköz, mellyel a (2.17) (vagy akár a (2.5)) egyenletből számolt analitikus eredményünk és a szimulációval kapott értékek relatív hibája kisebb az ε hibahatárnál. Ez azt jelenti, hogy az analitikus formulák tetszőleges időtartamra kiterjeszthetők ha a lépésközt megfelelően választjuk meg.

2.4. Következtetések

A dolgozat ezen részében a folytonos idejű kvantumos bolyongások dinamikai tulajdonságait tanulmányoztam perkolált gráfokon. Megvizsgáltam az egyedi rendszerek egyes trajektóriáinak, valamint a szuperoperátor formalizmus segítségével átlagolt rendszer tulajdonságainak időfejlődését. Az erős perkoláció két módon érhető el, melyek különböző dinamikára vezetnek: rögzített lépésköz mellett vehetünk nagyon sok lépést hosszú idő alatt, vagy rögzíthetjük a vizsgált időtartamot, és egyre csökkenthetjük a gráf két megváltozása között eltelt τ időtartamot. Ezen utóbbi eset csak a folytonos idejű kvantumos bolyongások esetén tehető meg, mivel a diszkrét esetben a bolyongás dinamikája ad egy alsó korlátot arra, milyen sűrűn változtathatjuk a gráfot.

Abban a határesetben, amikor a gráf gyorsan változik, a rendszer időfejlődése egy egyszerű analitikus formulával írható le, a gyors perkoláció a perkolációmentes esettel összehasonlítva csak az idő átskálázásában jelentkezik. Ez az eredmény matematikailag egzaktul fennáll a $\tau \rightarrow 0$ határesetben. Másrészt, ha kicsi, de véges τ lépésközt veszünk, akkor az időfejlődés kezdeti szakaszán a skálázott, perkolációmentes időfejlődés jó közelítésnek minősül, majd hosszú idő elteltével egy rendszer időfejlődése egy kváziperiodikus függvény szerint fog változni, míg a szuperoperátor formalizmussal számolt átlagos dinamika azt mutatja, hogy az átlagolt viselkedés az egyensúlyi értékhez tart. A véges lépésközből adódó hiba mértékét numerikusan is megvizsgáltam. A szimulációk azt mutatták, hogy adott rendszerre a lépésköz gondos megválasztásával az az időtartam, amíg általunk javasolt modell adott hibahatár mellett pontos eredményt ad akár nagy időtartamokra is kiterjeszthető [I].

3. fejezet

Folytonos idejű kvantumos bolyongások tulajdonságai Sierpiński-fraktálokon

Ebben a fejezetben folytonos idejű kvantumos bolyongások transzport tulajdonságait vizsgáljuk meg a Sierpiński-háromszögön és a Sierpiński-szőnyegen, valamint ezek duálisán véges generációjú gráfok segítségével [III].

3.1. Irodalmi áttekintés

A bolyongások dinamikai és transzport tulajdonságait alapvetően meghatározza a gráf amin a bolyongás történik. A gráfok között különös figyelmet kaptak a fraktál gráfok, melyeken a hagyományos gráfoktól eltérő dinamikát mutatott a klasszikus bolyongás (például a spektrál dimenzió [32] megjelenése), mely effektusok sok esetben a gráf önhasznós szerkezetéből származtak [116, 117].

Fraktálokon történő kvantumos bolyongásokra is találunk példát az irodalomban, többek között a kvantumos bolyongáson alapuló keresési algoritmusokban az órákulum hívások száma is a spektrál dimenzió szerint skálázódik [118, 119]. Néhány fraktál esetén, például a Sierpiński-háromszög [120, 121], vagy a Vicsek-fraktál [122], a gráf Laplace-mátrixának sajátértékei analitikusan meghatározhatóak, így a bolyongás bizonyos kvantitatív tulajdonságai is egzaktul felírhatóak.

Fraktálokon történő kvantumos bolyongás esetén felléphet a gráf szerkezetéből adódó lokalizáció is [123]. Hasonló jelenséget figyelhetünk meg szilárdtestfizikai modellekben, amikor egy fraktálon (például a Sierpiński-háromszögön) mozgó részecske esetén a Schrödinger-egyenletet

a szoros kötésű (*tight-binding*) közelítésben oldjuk meg [124, 125]. Fraktál szerkezetű hullámvezetőkben klasszikus hullámokat használva a Sierpiński-háromszög esetén kísérletileg is igazolták a lokalizációt [126].

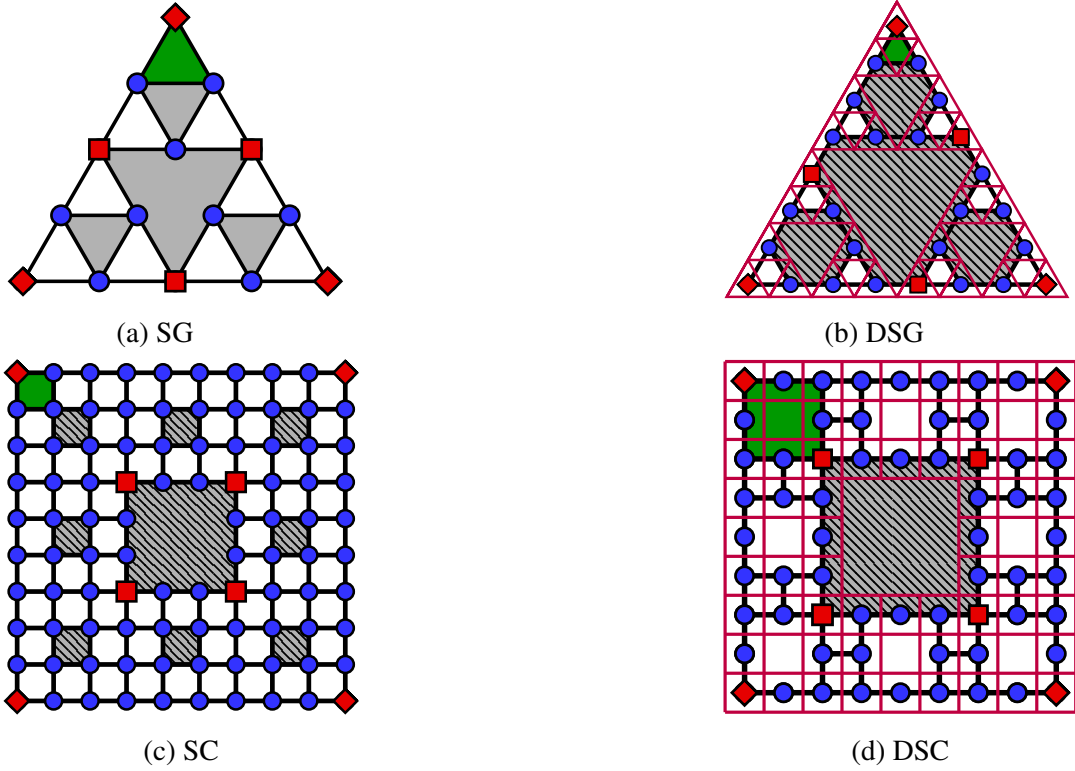
3.1.1. Sierpiński-fraktálok

Jelen fejezetben a Wacław Sierpiński lengyel matematikus után Sierpiński-fraktáloknak [127] nevezett fraktálok két típusán fogjuk a bolyongást vizsgálni, a Sierpiński-háromszögon és a Sierpiński-szőnyegen, valamint ezek duálisán. Az említett struktúrák determinisztikus fraktálok, azaz egy iterációval megadható, hogy hogyan tudjuk felépíteni őket egy kezdeti blokk adott szabály szerinti ismétléséből. Azt, hogy a felépítés során hanyadik lépésben tartunk a fraktál *generációjának* hívjuk. Tekintsük most át, hogyan építhetjük fel a kérdéses fraktálokat.

A Sierpiński-háromszög (*Sierpiński gasket*, *SG*) [128] kiinduló alakzata egy olyan gráf, ami 3 csúcsot tartalmaz, mint az a 3.1(a) ábrán is látható zöld háttérrel. A következő lépésben a háromszög két alsó csúcsához illesztjük a már meglévő háromszög struktúráját, így egy önhasználó alakzatot állítva elő, eközben a csatolt háromszög csúcsát a már ott lévő csúccsal egybeejtjük. Ezt a folyamatot iterálva a lépések számával a végtelenbe tartva megkapjuk az egzakt Sierpiński-háromszöget. A 3.1(a) ábrán a harmadik generációt ábrázoltuk, szürke háttérrel a „lyukakat” illusztráltuk, vörös négyzetekkel és rombuszokkal pedig a csapdák helyeit jelöltük, melyekről a következő fejezetben lesz szó. A fraktált alkotó csúcsok száma a g -edik generációban $N_{SG} = (3^g + 3)/2$.

A következő alakzat a Sierpiński-szőnyeg (*Sierpiński carpet*, *SC*) [129], melyet a korábbihoz hasonló iterációval állíthatunk elő. Ebben az esetben a kiindulási alakzat egy négy csúcsot tartalmazó négyzet alakú gráf, és egy lépésben hét példányt csatolunk a már meglévőhöz, a csatoláshoz használt csúcspontokat itt is összeejtve. A harmadik generációs gráf a 3.1(c) ábrán látható. A g generációs gráfban $N_{SC} = \frac{11}{70}8^g + \frac{8}{15}3^g + \frac{8}{7}$ csúcs található.

A fent említett két típus mellett ezek duálisán is megvizsgáltuk a bolyongás tulajdonságait. A gráfok duálisát [130, 131] úgy kapjuk, hogy az eredeti struktúrában a legkisebb szerkezeti egységet (háromszögre a háromszöget, szőnyegre a négyzetet) egy csúccsal helyettesítjük, az így kapott csúcsok közül pedig összekötjük azokat, amelyek olyan szerkezeti egységekből keletkeztek, melyeknek volt közös csúcsuk. A szőnyeg esetén a duális gráf előállításánál során csak



3.1. ábra. A fejezetben vizsgált gráfok, a Sierpiński-háromszög (a) és a duálisa (b), valamint a Sierpiński-szőnyeg (c) és a duálisa (d). A DSC kivételével, mely második generációs ($g = 2$) a többi gráf a harmadik generációt ($g = 3$) mutatja. Zöld háttérrel az első generációs ($g = 1$), kiinduló gráfot jelöltünk, a lyukakat pedig csíkos szürke háttérrel jelöltük. A csapdákat vagy a gráf szélére (vörös rombusz) vagy a gráf közepére (vörös négyzet) tettük.

függőleges és vízszintes éleket engedünk meg. Az így kapott fraktálok, a duális Sierpiński-háromszög (*DSG*) a 3.1(b), a duális Sierpiński-szőnyeg (*DSC*) a 3.1(d) ábrán láthatóak, valamint piros vonalakkal illusztráltuk a duális gráf származtatási elvét is. A g generációs *DSG* csúcsainak száma $N = 3^g$, a *DSC* csúcsainak száma pedig $N = 8^g$.

3.1.2. Spektrál dimenzió

Ebben a fejezetben a bolyongás transzport tulajdonságait, azaz a terjedés gyorsaságát vizsgáljuk. Mint azt a bolyongásokról szóló általános bevezetőben is láttuk, a visszatérési valószínűség jól jellemezheti a transzport hatékonyságát. A klasszikus bolyongások esetén egy adott gráfra a visszatérési valószínűség viselkedése jól jellemezhető a *spektrál dimenzió*nak nevezett mennyiséggel, ezért ezt az alfejezetet ennek megismerésének szenteljük.

Definíció

A folytonos idejű véletlen bolyongást bemutató fejezetben láttuk, hogy a rendszert leíró

$$T_{k,j} = \begin{cases} -\gamma, & \text{ha } j \text{ és } k \text{ szomszédosak,} \\ 0, & \text{ha } j \text{ és } k \text{ nem szomszédosak,} \\ d\gamma, & \text{ha } j = k, \end{cases} \quad (1.3)$$

mátrixnak van egy olyan sajátvektora, melynek minden eleme 1, az ehhez a sajátvektorhoz tartozó sajátérték pedig a nulla. Ebből következik, hogy a

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_n p_{j,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_n e^{-\lambda_n t} \quad (1.15)$$

átlagos visszatérési valószínűség az $1/N$ értékhez tart. Ez azt sugallja, hogy létezik egy stacionárius eloszlás, melyhez a bolyongás tart, függetlenül attól, hogy honnan indítottuk a bolyongót. Legyen a $G(V, E)$ gráf (ahol V a gráfot alkotó csúcsok, E pedig az élek halmaza) amin a bolyongás történik összefüggő (bármely két csúcsa között halad út), irányítatlan (a (v_i, v_j) él azonos a (v_j, v_i) éllel, nincs irányítás) és nem páros (G csúcsainak halmazát nem lehet felosztani két diszjunkt A és B halmazra úgy, hogy az összes élre teljesüljön, hogy egyik végpontja A -ban, a másik B -ben van), véges gráf. Ekkor belátható [132], hogy a bolyongás a

$$p_v = \frac{d(v)}{2|E|} \quad (3.1)$$

eloszláshoz tart, ahol p_v a $v \in V$ csúcson való megtalálás valószínűsége, $d(v)$ a v csúcs fokszáma, $|E|$ pedig a gráfban található élek száma. Például egy N csúcsot tartalmazó gyűrű (ld. 2.1 ábra) esetén minden csúcs fokszáma 2, és $|E| = N$ élet tartalmaz a gráf, tehát $p_v = \frac{1}{N}$ bármely $v \in V$ esetén. Kihasználva azt a tényt, hogy a \mathbf{T} mátrix a $\gamma = 1$ választással a gráf Laplace-mátrixa belátható, hogy összefüggő gráf esetén az egyensúlyi eloszlás $p_v = 1/N$ bármely $v \in V$ esetén. A \mathbf{T} mátrixnak a 0 egyszeres sajátértéke, a hozzá tartozó sajátvektor pedig egy olyan vektor, aminek minden eleme azonos, például 1 [133]. Ekkor ha a $|k\rangle$ helyeknek egy N dimenziós vektortér ortonormált bázisát feleltetjük meg, akkor az (1.11) egyenlettel definiált $p_{k,j}(t)$ átmeneti valószínűségekről a $\sum_k p_{k,j}(t) = 1$ normálás felhasználásával belátható, hogy a $t \rightarrow \infty$ határesetben $p_{k,j}(t) = p_k = 1/N$ bármely j és k esetén, azaz az egyensúlyi értéket kaptuk.

Idézzük fel a

$$P_0^c(t) = p_{0,0}(t) \quad (1.12)$$

visszatérési valószínűség fogalmát is. Ez a mennyiség azt hivatott jellemezni, hogy mi a valószínűsége annak, hogy a bolyongó visszatér a kiindulási helyére, azaz az adott t időpontban milyen valószínűséggel található meg az indulás helyén. Mivel a stacionárius eloszlás független attól, hogy honnan indítottuk a bolyongót, ezért a 0 indexszel jelölt csúcs esetén is hosszú idő elteltével a csúcson való megtalálás valószínűsége a stacionárius értékhez tart. Ez természetesen bármely, a gráfot alkotó csúcsra igaz, azaz

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_v^c(t) = p_v \quad \forall v \in V. \quad (3.2)$$

Amennyiben a rendszer méretét növeljük, úgy a p_v értékek egyre csökkennek, a gráfot tartalmazó csúcsok (és élek) számával a végtelenbe tartva pedig p_v nullához tart. Ennek következtében, ha egy végtelen gráfon, például egy d dimenziós négyzetes rácson (\mathbb{Z}^d -n) történő bolyongást nézünk, akkor a kezdőpontba való visszatérés valószínűsége is nullához tart,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_0^c(t) = 0. \quad (3.3)$$

Ha egy mennyiség az idővel nullához tart, akkor megkérdezhetjük, hogy milyen a lecsengése. Erre a kérdésre adja meg a választ a spektrál dimenzió (*spectral dimension*), ugyanis a visszatérési valószínűség lecsengése az idő hatványfüggvénye szerint történik,

$$P_0^c(t) \propto t^{-d_s/2}, \quad (3.4)$$

ahol a kitevőben szereplő d_s mennyiség a már említett spektrál dimenzió [31]. Természetesen valós fizikai rendszerekben nem növelhetjük a rendszer méretét minden határon túl, véges rendszerekben a visszatérési valószínűség (nem túl kis rendszer esetén) szintén mutatja a $t^{-d_s/2}$ lecsengést [54], azonban a véges méret effektusok miatt csak egy adott időtartamig, ugyanis mint korábban láttuk $P_0^c(t)$ egyensúlyi értéke $1/N$. Véges rendszerek esetén a spektrál dimenzió szerinti lecsengésre a későbbiekben számos példát fogunk látni.

Felmerülhet a kérdés, hogy miért is nevezzük a d_s mennyiséget spektrál dimenziónak, milyen mennyiség spektrumához köthető. A dimenzió szó hallatán az embernek általában elsőként a térbeli dimenziók jutnak eszébe, valamint pozitív egész számok. A matematika irodalmában azonban léteznek olyan alakzatok is, melyek dimenziója nem egész szám, ezek a fraktálok, ezen alakzatok elnevezése is a latin *fractus*, tört szóból ered. A fraktáloknak gráfokat is meg lehet feleltetni, ha pedig van egy gráfunk, akkor semmi nem tarthat vissza bennünket attól, hogy azon tanulmányozzuk a véletlen bolyongást, és összehasonlítsuk a normál euklideszi tereken

kapott eredményekkel. Az euklideszi rendszereket egy mennyiséggel jól lehet jellemezni, ez pedig a d dimenziójuk. Az önhasonló rendszerek esetén viszont, mint amilyenek a fraktálok is, legalább három hasonló mennyiségre van szükségünk: a d beágyazási dimenzióra, a d_f fraktál, vagy más néven Hausdorff-dimenzióra, illetve a d_s spektrál dimenzióra [32]. Mint a neve is mutatja, a beágyazási dimenzió annak a legalacsonyabb dimenziójú euklideszi térnek a dimenzióját adja meg, mely tartalmazza a vizsgált fraktált [134]. A fraktáldimenzió a fraktál önhasonló szerkezetét hivatott jellemezni. Ha a vizsgált objektum K azonos alkotóelemből áll össze úgy, hogy a teljes objektum mérete r -szerese egy alkotóelem méretének, akkor a Hausdorff-dimenziója [135]

$$d_f \equiv \frac{\ln(K)}{\ln(r)}. \quad (3.5)$$

Euklideszi terekben a három mennyiség azonos [32], $d = d_f = d_s$. Az általunk vizsgált Sierpiński-fraktálok beágyazási dimenziója $d = 2$, a fraktáldimenzió pedig a 3.1 ábra alapján

$$d_f = \frac{\ln(3)}{\ln(2)} \approx 1.585 \quad (3.6)$$

a Sierpiński-háromszögre és duálisára, míg

$$d_f = \frac{\ln(8)}{\ln(3)} \approx 1.893 \quad (3.7)$$

a Sierpiński-szőnyegre és duálisára az egzakt fraktál esetén, azaz a generációk számával a $g \rightarrow \infty$ határesetet véve. A Sierpiński-háromszögekre a spektrál dimenzió értéke analitikusan ismert [32],

$$d_s = 2 \frac{\ln(3)}{\ln(5)} \approx 1.356, \quad (3.8)$$

míg a Sierpiński-szőnyegek analitikus formula jelenleg nem ismert, $d_s \approx 1.805$ a numerikus szimulációk szerint [136].

Mielőtt rátérnénk arra, hogy milyen mennyiség spektrumával kapcsolatos a spektrál dimenzió, lássunk egy konkrét példát, amely bemutatja a $d = d_f = d_s$ degenerációt, valamint nézzük meg, hogy mi változik ha nem klasszikus, hanem kvantumos bolyongást veszünk.

Egy konkrét példa

A legegyszerűbb eset az, amikor a d dimenziós négyzetes rácson, \mathbb{Z}^d -n történő klasszikus véletlen bolyongást, illetve kvantumos megfelelőjét tekintjük. Nyilvánvaló, hogy ekkor a beágyazási dimenzió és a fraktáldimenzió megegyezik a d dimenzióval, a spektrál dimenziót kell

még megvizsgálunk. A klasszikus bolyongás esetén az origóba való visszatérés valószínűsége

$$P_0^c(t) = [e^{-2t} I_0(2t)]^d \simeq \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \propto t^{-d/2} \quad (3.9)$$

alakú a $t \rightarrow \infty$ határesetben [137], ahol $I(t)$ az elsőfajú nulladrendű módosított Bessel-függvény [138]. Látható, hogy a (3.4) szerinti aszimptotikus, hatványfüggvény szerinti lecsengést kaptuk és $d_s = d$, ahogy azt vártuk is.

A folytonos idejű kvantumos bolyongás esetén a visszatérési valószínűség

$$P_0(t) = \left[\prod_{i=1}^d J_0(2t) \right]^2 \simeq \left[\frac{1}{\pi t} \cos^2 \left(2t - \frac{\pi}{4} \right) \right]^d \propto t^{-d} \quad (3.10)$$

alakú [139], ahol $J_0(t)$ az elsőfajú nulladrendű Bessel-függvény. Aszimptotikusan itt is az idővel hatványfüggvény szerinti lecsengést kaptuk, a kitevőben pedig megjelent a d dimenzió is, azonban a kvantumos bolyongás esetén a kitevő kétszer akkora, mint a klasszikus bolyongásra. Ezt akár úgy is interpretálhatjuk, hogy a kvantumos esetben az $\alpha_{k,j}(t)$ átmeneti amplitúdót hasonlóan kell számolni mint a klasszikus esetben a $p_{k,j}(t)$ valószínűséget, a rendszer kvantumos természetéből adódóan pedig $\alpha_{k,j}(t)$ -t négyzetre kell emelni hogy egy valószínűséget kapjunk, és ebből ered a kettes faktor a kitevőben. Nemsokára azonban látni fogjuk, hogy az általunk vizsgált rendszereken teljesen más jellegű dinamika zajlik le mint a klasszikus megfelelőjükön.

A spektrál dimenzió matematikai háttere

A spektrál dimenzió bevezetését Alexander és Orbach javasolta [140]. Egy korábbi cikkükben a

$$C_n \frac{dP_n}{dt} = W_{n,n-1}(P_{n-1} - P_n) + W_{n,n+1}(P_{n+1} - P_n) \quad (3.11)$$

mester (*master*) egyenlettel leírható gerjesztések dinamikáját vizsgálták véletlen egydimenziós rendszerekben [141]. Ez a leírás alkalmazható többek között egy részecske diffúziójának leírására véletlen átmeneti rátákkal, véletlen Heisenberg ferromágnes alacsony hőmérsékleti tulajdonságainak vizsgálatára, egydimenziós szoros kötésű (*tight-binding*) fermionrendszerekre, vagy egy olyan elektromos hálózatra, amely kondenzátorokat és ellenállásokat tartalmaz. Ha a fenti egyenletben második deriváltat veszünk, akkor az

$$M_n \frac{d^2 P_n}{dt^2} = W_{n,n-1}(P_{n-1} - P_n) + W_{n,n+1}(P_{n+1} - P_n) \quad (3.12)$$

egyenlet egy véletlen rugóállandókkal vagy véletlen nagyságú tömegekkel ellátott lánc rezgéseit írja le. Véve a két egyenlet Laplace-transzformáltját és kihasználva, hogy a második derivált Laplace-transzformáltja csak egy konstans szorzófaktorban tér el az első derivált Laplace-transzformáltjától, a két egyenlet megoldásához hasonló matematikai formalizmus szükséges [141]. Természetesen a gondolatmenet alkalmazható nem véletlen, hanem konstans C és W állandókra is.

Idézzük fel a folytonos idejű véletlen bolyongás definiálása során használt

$$\frac{d}{dt} p_{k,j}(t) = - \sum_l T_{k,l} p_{l,j}(t) \quad (1.9)$$

differenciálegyenletet. A $p_{k,j}(t)$ valószínűség azt mutatja meg, hogy ha a bolyongót a j pontból indítjuk, akkor milyen valószínűséggel jut el a k pontba t idő alatt, azaz mekkora a k pontban való tartózkodás valószínűsége. Tekintsük a bolyongást egy számegyenesen, és indítsuk a nullából. Ekkor a $p_{0,n}(t) = \delta_{0,n}$ kezdeti feltétel kiírásával a 0 indexet akár el is hagyhatjuk, és a gráfnak megfelelő (1.3) mátrixelemeket beírva a differenciálegyenletbe, az a

$$\frac{d}{dt} p_n(t) = p_{n-1}(t) + p_{n+1}(t) - 2p_n(t) \quad (3.13)$$

alakot ölti. A (3.11) egyenletben ha a C és W együtthatókat konstansnak és egyenlőnek választjuk, akkor ugyanilyen alakú egyenletet kapunk. A differenciálegyenlet megoldása, mint ahogy a bevezetőben is láttuk

$$p_{k,j}(t) = \langle k | e^{-\mathbf{T}t} | j \rangle = \sum_n e^{-E_n t} \langle k | q_n \rangle \langle q_n | j \rangle . \quad (1.11)$$

Vezessük be az

$$a_n = \langle 0 | q_n \rangle \langle q_n | 0 \rangle \quad (3.14)$$

jelölést, ekkor a visszatérési valószínűség

$$P_0^c(t) = p_{0,0}(t) = \sum_n a_n e^{-E_n t} \quad (3.15)$$

alakú, ahol E_n az (1.3) egyenlettel definiált \mathbf{T} mátrix sajátértékeit jelöli. Ha végtelen rendszereket vizsgálunk, akkor a fenti egyenletben a szumma helyét egy, a sajátértékekre vett integrál veszi át,

$$P_0^c(t) = \int_0^\infty \rho(E) a(E) e^{-E t} dE , \quad (3.16)$$

ahol $\rho(E)$ a sajátértékek *állapotsűrűsége* (*density of states*) [31]. Hasonló áttérést a

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_n p_{j,j}(t) = \frac{1}{N} \sum_n e^{-E_n t} \quad (1.15)$$

átlagos visszatérési valószínűség esetén is megtehetünk, az $N \rightarrow \infty$ határesetben a

$$\bar{p}(t) = \int_0^\infty \rho(E) e^{-E_n t} dE \quad (3.17)$$

alakot ölti. Kvantumos bolyongás estén a fentiekkel analóg módon az (1.22) visszatérési valószínűség alakja, ha a rendszer méretével a végtelenbe tartunk

$$P_0(t) = \left| \int_0^\infty \rho(E) A(E) e^{-iE_n t} dE \right|^2, \quad (3.18)$$

ahol bevezettük az

$$A_n = \langle 0 | \phi_n \rangle \langle \phi_n | 0 \rangle \quad (3.19)$$

jelölést. Az átlagos visszatérési amplitúdó pedig a (1.27) definíció felhasználásával

$$|\bar{\alpha}(t)|^2 = \left| \int_0^\infty \rho(E) e^{-iE_n t} dE \right|^2, \quad (3.20)$$

amit láthatóan teljes egészében meghatároz a Hamilton-operátor spektruma [18].

A $\rho(E)$ állapotossűrűségről belátható [140, 141], hogy

$$\rho(E) \propto E^{d_s/2-1} \quad \text{ha} \quad E \rightarrow 0. \quad (3.21)$$

A korábban említett (3.11) és (3.12) egyenletek hasonlóságát kihasználva pedig az is belátható [140, 141], hogy ha a gráf csúcsainak tömegeket, az éleknek pedig rugókat feleltetünk meg, akkor a rendszer spektrumára a $\rho(\omega) \propto \omega^{d_s-1}$ összefüggés érvényes ha $\omega \rightarrow 0$. Mint korábban említettük, a (3.11) egyenlet alkalmazható elektromos hálózatokra is [141–143]. A rendszer ellenállása a rendszer méretét növelve exponenciálisan skálázódik, és a kitevőben itt is a spektrál dimenzió jelenik meg [54]. Egyszerű rácsokra (négyzetes rácsok, háromszögrács, stb.) a rendszer két rácspontja közötti ellenállás analitikusan is kiszámolható [144, 145]. Az ilyen alakú egyenletek azon tulajdonsága, hogy fizikai rendszerek széles körére alkalmazhatóak ahhoz köthető, hogy az egyenlet jobb oldala megfeleltethető a Laplace-operátor diszkrét formájának [146].

Klasszikus bolyongásokra elég nagy időt véve a visszatérési valószínűséget a spektrum kezdeti szakasza határozza meg. Fraktálokra a sajátértékek állapotssűrűsége a spektrál dimenzió

szerint skálázik, ez okozza a visszatérési valószínűség d_s által meghatározott, hatványfüggvény szerinti lecsengését. Kvantumos bolyongások esetén más a helyzet, az átlagos visszatérési amplitúdóban a magasan degenerált sajátértékek veszik át a vezető szerepet. Ekkor egy teljesen más dinamikát kapunk: a nullához való lecsengés helyett $|\bar{\alpha}(t)|^2$ maradhat véges, azaz megjelenik a lokalizáció a rendszerben. A következő pontban ennek a matematikai hátterét tekintjük át.

3.1.3. Lokalizáció vizsgálata

Időátlagok

Kvantumos bolyongások esetén a rendszer unitér dinamikája nem engedi meg, hogy a $\pi_{k,j}(t)$ átmeneti valószínűségnek véges rendszerekre létezzen a határértéke a $t \rightarrow \infty$ határesetben. Ezért vezessük be a

$$\chi_c = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{p}(t) dt \quad (3.22)$$

$$\chi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \bar{\pi}(t) dt \quad (3.23)$$

$$\chi_{lb} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\bar{\alpha}(t)|^2 dt \quad (3.24)$$

időátlagokat az átlagos visszatérési valószínűségekre mind a klasszikus (χ_c), mind pedig a kvantumos bolyongások esetén (χ), valamint az átlagos visszatérési amplitúdóra a kvantumos esetben (χ_{lb}), ahol az lb alsó index azt jelzi, hogy χ_{lb} a χ időátlagra egy alsó korlátot ad (*lower bound*) [68, 147]. Mint azt korábban láttuk, klasszikus bolyongások esetén az (1.3) mátrixnak az $E_1 = 0$ mindig sajátértéke és nem degenerált, ezért az (1.15) klasszikus átlagos visszatérési valószínűséget írhatjuk

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} + \frac{1}{N} \sum_{n=2}^N e^{-E_n t} \quad (3.25)$$

alakban. Ekkor hosszú időtartamot véve a szummában szereplő tagok lecsengenek, így $\bar{p}(t)$ az $1/N$ értékhez tart ha az idővel a végtelenbe tartunk. Ebből az is következik, hogy $\chi_c = 1/N$ a rendszer topológiájától függetlenül. Most vizsgáljuk meg, hogyan lehet meghatározni a kvantumos esetben az időátlagokat. Vezessük be a

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(E - E_n) \quad (3.26)$$

(diszkrét) állapotsűrűséget, ahol $\delta(E - E_n)$ a Dirac-delta disztribúció [148]. Integrálva az E_m sajátérték körüli infinitezimálisan kis tartományra

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{E_m - \varepsilon}^{E_m + \varepsilon} \tilde{\rho}(E) dE = D(E_m)/N \equiv \rho(E_m), \quad (3.27)$$

ahol $D(E_m)$ azt adja meg, hogy hányszorosan degenerált az adott sajátérték, valamint bevezetjük a $\rho(E_m)$ mennyiséget, mely azt mutatja meg, hogy az E_m sajátérték degeneráltsági foka mekkora hányada az összes sajátértékek számának. Az E_m sajátértéket a későbbiekben erősen degeneráltnak nevezzük, ha a rendszer méretét, ezáltal a sajátértékek számát növelve $\rho(E_m)$ nem tart nullához az $N \rightarrow \infty$ határesetben. Ezen mennyiségek felhasználásával

$$\bar{p}(t) = \sum_{\{E_m\}} \rho(E_m) \exp(-E_m t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}(E) \exp(-Et) dE \quad (3.28)$$

és

$$|\bar{\alpha}(t)|^2 = \left| \sum_{\{E_m\}} \rho(E_m) \exp(-iE_m t) \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}(E) \exp(-iEt) dE \right|^2, \quad (3.29)$$

ahol az összegzés a különböző E_m sajátértékek $\{E_m\}$ halmazára történik. Tegyük fel, hogy van egy olyan E_m sajátérték, amely erősen degenerált, így ezt vizsgáljuk meg külön. A fenti képletben az integrálást felbonthatjuk úgy, hogy abból egy infinitezimálisan kis részt E_m körül kivesszünk, ekkor azt kapjuk, hogy

$$|\bar{\alpha}(t)|^2 \approx \rho^2(E_m) + \rho(E_m) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{E_m - \varepsilon} \tilde{\rho}(E) \cos[(E - E_m)t] dE + \int_{E_m + \varepsilon}^{\infty} \tilde{\rho}(E) \cos[(E - E_m)t] dE \right], \quad (3.30)$$

azaz $|\bar{\alpha}(t)|^2$ a $\rho^2(E_m)$ érték körül oszcillál [65]. Véve az időátlagot ezt egzaktul meg is kapjuk,

$$\chi_{lb} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left[\frac{1}{N^2} \sum_{n,m} e^{-i(E_n - E_m)t} \right] dt = \frac{1}{N^2} \delta_{E_n, E_m} = \frac{1}{N} \sum_n \rho(E_n) = \sum_{\{E_m\}} [\rho(E_m)]^2, \quad (3.31)$$

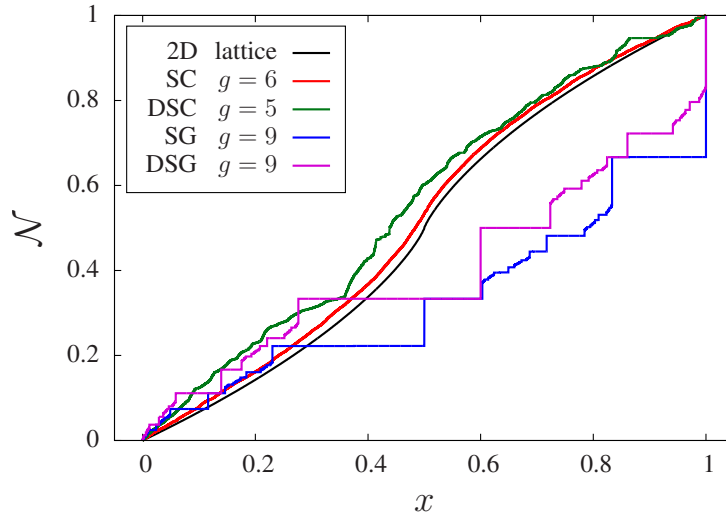
ahol az utolsó összegzés ismét a különböző sajátértékekre történik [65]. Amennyiben van legalább egy erősen degenerált sajátérték, azaz egy olyan E_m amire $\rho(E_m)$ nem tart nullához ha a rendszer méretével a végtelenbe tartunk, akkor $\chi_{lb} = [\rho(E_m)]^2$. Ha a rendszerben nincs ilyen sajátérték, például ha minden sajátérték különböző, akkor $\rho(E_n) = 1/N$ minden n -re, ekkor természetesen $\chi_{lb} = 1/N$.

A vizsgált rendszerek spektruma

A korábbi fejezetek alapján látható, hogy a Hamilton-operátor spektruma milyen fontos szerepet tölt be a bolyongások vizsgálatakor. Ennek segítségével jól lehet karakterizálni a rendszeren történő folytonos idejű kvantumos, illetve klasszikus folytonos idejű bolyongás dinamikáját, és a transzport gyorsaságát. A különböző fraktálokra a részletes tárgyalást egyenként végezzük majd el, azonban célszerű a különböző gráfokhoz tartozó spektrumokat összehasonlítani egymással. Erre egy szemléletes eszköz az

$$\mathcal{N}(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Theta\left(x - \frac{E_n}{E_{\max}}\right), \quad (3.32)$$

normált kumulatív sajátérték számláló függvény (*normalized cumulative eigenvalue counting function*), mely azt mutatja meg, hogy hány olyan sajátérték van, amely a legnagyobb sajátértékkel normálva kisebb x -nél. Annak érdekében, hogy a függvény értelmezési tartománya és értékkészlete is a $[0,1]$ intervallum legyen, ezért normáltuk a sajátértékeket a legnagyobb sajátértékkel, a függvényértékeket pedig a sajátértékek N számával. A későbbiekben vizsgált gráfokra a függvény a 3.2 ábrán látható.



3.2. ábra. Az $\mathcal{N}(x)$ függvény (ld. (3.32) egyenlet) a vizsgálandó rendszerekre és a kétdimenziós négyzetes rácsra.

Az ábrán feltüntettük a kétdimenziós négyzetes rács esetén is az $\mathcal{N}(x)$ függvényt, amely jó referenciaként szolgál, ugyanis a későbbiekben vizsgálandó fraktálok beágyazási dimenziója is 2. Az ábrán láthatunk egy példát egy euklideszi rendszer spektrumára vonatkozóan is (fekete görbe). Látható, hogy ez egy sima görbe, nincsenek benne ugrások. Ez azt sugallja, hogy

nincsenek benne erősen degenerált sajátértékek, ellenkező esetben egy ilyenhez érve hirtelen ugrást tapasztalnánk. Pont ezt a viselkedést láthatjuk pink és kék színnel, melyek a Sierpiński-háromszöghöz illetve a duálisához tartoznak. Ezen rendszerek spektrumában sok erősen degenerált sajátérték van, ebből ered a lépcsős függvény. Az ábrán lévő további két görbe a Sierpiński-szőnyeghez (piros) illetve duálisához (zöld) tartozik. Jól látható, hogy a Sierpiński-szőnyeg spektruma nagyon közel áll a kétdimenziós rácshoz, és nem látunk nagy ugrást a görbén. Valóban, ha megnézzük a 3.1 ábrát, akkor ez a rendszer áll legközelebb a rácshoz. A szőnyeg duálisához tartozó görbe egy már nem olyan sima függvényt sugall, de látni fogjuk, hogy mindkét rendszer esetén nehéz meghatározni, hogy van-e erősen degenerált sajátérték a végtelen fraktálon, valamint azt is, hogy ezekre a rendszerekre sokkal hatékonyabb a transzport mint a Sierpiński-háromszögekre.

3.1.4. Csapdázás modellezése

A lokalizáció vizsgálatához eddig a Hamilton-operátor spektrumát vizsgáltuk. Ebben a pontban bemutatunk egy kissé eltérő módszert, amivel szintén lehet a rendszerben jelen lévő lokalizáció nyomait kutatni. Cseréljük ki a gráf egyes csúcsait *csapdákra* (*traps*) vagy más néven *elnyelőkre* (*drains*). Csapdák nélkül mind a klasszikus, mind pedig a kvantumos rendszerben az egyes csúcsokra vett megtalálási valószínűségeket az összes lehetséges csúcsra felösszegezve egyet kapunk, ugyanis valahol biztosan megtaláljuk a bolyongót a gráfon. A csapdák jelenlétében azonban a bolyongó el tudja hagyni a rendszert, ekkor a megtalálási valószínűségeket a gráf csúcsaira összegezve nem feltétlenül kapunk egyet, ezt a mennyiséget nevezik *túlélési valószínűségnek* [149]. A túlélési valószínűség tulajdonságainak vizsgálata mind a klasszikus, mind a kvantumos bolyongások témakörében jelenleg is aktív terület [150].

Hasonló csapdázási modelleket mind klasszikus, mind pedig kvantumos rendszerekre széles körben alkalmaznak. Egyik ilyen terület a molekulák és kémiai reakciók dinamikájának leírása [151–153]. Tegyük fel, hogy a reakcióban két komponens vesz részt, jelöljük ezeket A -val illetve B -vel. A köztük lezajló reakcióról pedig tegyük fel hogy $A + B \rightarrow B$ alakú, azaz a kölcsönhatás során az A komponens eltűnik, a B komponens pedig megmarad. Ez a reakció tekinthető úgy, hogy az A komponens a bolyongónak, a B pedig a csapdának felel meg [154, 155]. A reakció lehet $A + B \rightarrow C$ alakú, csapadékképződéssel járó reakció is, ekkor megjelenhetnek a rendszerben a Liesegang-gyűrűk (*Liesegang patterns*) [156, 157], ezek leírására is alkalmazható modellként a véletlen bolyongás [158]. Csapdázott bolyongási modelleket a fotoszintézis

során a molekulában történő gerjesztések leírására is alkalmaztak [159, 160].

Folytonos idejű kvantumos bolyongásokban a csapdázás bevezetését Mülken és társai javasolták [161–163]. Jelen kutatásban is ezt a modellt használtuk, ezért most részletesen be is mutatjuk [18]. Mint azt korábban láttuk, a klasszikus illetve kvantumos folytonos idejű bolyongások dinamikáját a \mathbf{T} mátrix illetve a \hat{H} Hamilton-operátor segítségével írhatjuk fel. Most a gráf N csúcsából válasszunk ki M darabot, ezeket a csúcsokat fogjuk csapdának tekinteni. Vezessük be a

$$\mathbf{\Gamma} \equiv \Gamma \sum_{m \in \mathcal{M}} |m\rangle \langle m| \quad (3.33)$$

csapdázási mátrixot (*trapping matrix*), ahol \mathcal{M} a csapdák halmazát jelöli. Ekkor a \mathbf{T}_t mátrixot illetve a \hat{H}_t operátor \mathbf{H}_t mátrix reprezentációját

$$\mathbf{T}_t \equiv \mathbf{T} + \mathbf{\Gamma} \quad (3.34)$$

illetve

$$\mathbf{H}_t \equiv \mathbf{H} - i \mathbf{\Gamma} \quad (3.35)$$

módon vezetjük be a csapdákkal ellátott rendszeren. Itt már láthatjuk, hogy lesz egy alapvető különbség a két mennyiség spektrumában. A \mathbf{T}_t mátrix továbbra is valós szimmetrikus mátrix, a \mathbf{H}_t mátrix viszont nem, tehát sajátértékeit az $E_n = \varepsilon_n - i\gamma_n$ alakban írhatjuk, ahol ε_n, γ_n valós számok. A legtöbb esetben (mint amilyenek az általunk vizsgált rendszerek is) a \mathbf{H}_t mátrix jobb és baloldali sajátvektorai ($|\phi_l\rangle, |\tilde{\phi}_l\rangle$) egy teljes ortonormált bázist alkotnak [164],

$$\sum_{l=1}^N |\phi_l\rangle \langle \tilde{\phi}_l| = \mathbb{1}, \quad \text{és} \quad \langle \phi_l | \tilde{\phi}_{l'} \rangle = \delta_{l,l'}. \quad (3.36)$$

Ennek segítségével az átmeneti amplitúdó alakja [162]

$$\alpha_{k,j}(t) = \sum_{l=1}^N e^{-\gamma_l t} e^{-i\varepsilon_l t} \langle k | \phi_l \rangle \langle \tilde{\phi}_l | j \rangle. \quad (3.37)$$

Indítsuk a bolyongót a $j \notin \mathcal{M}$ csúcsból, ekkor annak a valószínűsége, hogy t idő múlva a $k \notin \mathcal{M}$ csúcsban van $\pi_{k,j}(t) = |\alpha_{k,j}(t)|^2$. Amennyiben ezt összegezzük az összes lehetséges csúcsra, akkor kapjuk a túlélési valószínűséget, melynek alakja

$$\sum_{k \notin \mathcal{M}} \pi_{k,j}(t) = \sum_{l=1}^N e^{-2\gamma_l t} \langle j | \phi_l \rangle \langle \tilde{\phi}_l | j \rangle - \sum_{l,l'=1}^N e^{-i(E_l - E_{l'})t} \sum_{m \in \mathcal{M}} \langle j | \phi_l \rangle \langle \tilde{\phi}_{l'} | m \rangle \langle m | \phi_l \rangle \langle \tilde{\phi}_l | j \rangle, \quad (3.38)$$

ahol kihasználtuk, hogy

$$\sum_{k \notin \mathcal{M}} |k\rangle\langle k| = \mathbb{1} - \sum_{m \in \mathcal{M}} |m\rangle\langle m|. \quad (3.39)$$

Átlagoljuk az így kapott túlélési valószínűséget az összes lehetséges kiindulási $j \notin \mathcal{M}$ pontra, ekkor kapjuk a

$$\begin{aligned} \Pi(t) &= \frac{1}{N-M} \sum_{j \notin \mathcal{M}} \sum_{k \notin \mathcal{M}} \pi_{k,j}(t) = \frac{1}{N-M} \sum_{l=1}^N e^{-2\gamma_l t} \left[1 - 2 \sum_{m \in \mathcal{M}} \langle \tilde{\phi}_l | m \rangle \langle m | \phi_l \rangle \right] + \\ &+ \frac{1}{N-M} \sum_{l,l'=1}^N e^{-i(E_l - E_{l'}^*)t} \left[\sum_{m \in \mathcal{M}} \langle \tilde{\phi}_{l'} | m \rangle \langle m | \phi_l \rangle \right]^2 \end{aligned} \quad (3.40)$$

átlagos túlélési valószínűséget [162]. Mi olyan rendszereket fogunk vizsgálni, melyekre $M \ll \ll N$, azaz a rendszer méretéhez képest a csapdák száma nagyon kicsi, ekkor

$$\sum_{m \in \mathcal{M}} \langle \tilde{\phi}_l | m \rangle \langle m | \phi_l \rangle \ll 1. \quad (3.41)$$

Elég nagy időtartamokat véve az oszcilláló tagok járulékát is elhanyagolhatjuk, így a túlélési valószínűséget közelíthetjük

$$\Pi(t) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \exp[-2\gamma_n t] \quad (3.42)$$

módon. Mi arra vagyunk kíváncsiak, hogy van-e véges valószínűsége annak, hogy a bolyongó örökre a rendszerben marad, így a továbbiakban a

$$\Pi_\infty \equiv \frac{N_0}{N} \quad (3.43)$$

aszimptotikus túlélési valószínűséget fogjuk használni, melyet a túlélési valószínűségből származtathatunk a $t \rightarrow \infty$ határesetben. A formulában szereplő N_0 azoknak a sajátértékeknek a számát jelöli, melyek tisztán valósak, azaz melyekre $\gamma_n = 0$.

Klasszikus rendszerekre a fentiekkel analóg módon járhatunk el, a túlélési valószínűséget definiálhatjuk

$$\Pi_c(t) = \frac{1}{N-M} \sum_{j \notin \mathcal{M}} \sum_{k \notin \mathcal{M}} p_{k,j}(t) \quad (3.44)$$

módon [165]. Az $M \ll N$ esetet és nagy időtartamokat véve ez közelíthető a

$$\Pi_c(t) \approx \frac{1}{N-M} e^{-\lambda_1 t} \left| \sum_{k \notin \mathcal{M}} \langle k | q_1 \rangle \right|^2 \quad (3.45)$$

kifejezéssel, ahol λ_1 a \mathbf{T}_t mátrix legkisebb sajátértéke, $|q_1\rangle$ pedig a hozzá tartozó sajátvek-

tor [165]. Mint említettük, a T_t transzfer mátrix valós és szimmetrikus, így sajátértékei valósak, sőt belátható [166], hogy az összes sajátérték pozitív, emiatt a $\Pi_c(t)$ túlélési valószínűség exponenciálisan tart nullához. Kvantumos rendszerekre a rendszerben lehetnek lokalizált állapotok, így $\Pi(t)$ lehet véges. Ezt matematikailag úgy lehet bemutatni, hogy a nemdegenerált perturbációszámítás segítségével a csatolási állandók felírhatóak $\gamma_n = \Gamma \sum_{m \in \mathcal{M}} |\langle m | \phi_n \rangle|^2$ alakban [18], azaz egy $|\phi_n\rangle$ lokalizált sajátállapotra ez az átfedés lehet nulla, ekkor Π_∞ nem nulla, így egyfajta indikátorként működhet a lokalizációra.

A bolyongások tulajdonságainak csapdák jelenlétében történő leírása nagyon szerteágazó terület, részletes bemutatása meghaladja jelen dolgozat kereteit. Egy friss, szemléletes rendszerekkel dolgozó művet azonban említenék, mely hasonló formalizmust használva mutatja be a klasszikus és kvantumos folytonos idejű bolyongások tulajdonságait csapdázott rendszerben [149].

3.2. Duális Sierpiński-háromszög

Első vizsgált rendszerünk a 3.1(b) ábrán látható duális Sierpiński-háromszög. Hasonlóan a többi általunk vizsgált rendszerhez, ez is egy determinisztikus fraktál, melyet generációról generációra fel tudunk építeni. Folytonos idejű kvantum bolyongást már vizsgáltak ilyen gráfon [139], ezeket az eredményeket most felidézzük, ugyanis jól be lehet rajtuk mutatni az általunk használt módszereket. Az említett publikációnak társszerzője Prof. Oliver Mülken és Prof. Alexander Blumen, akikkel közösen dolgoztunk a dolgozat ezen részének alapjául szolgáló cikken [III], így a következőkben bemutatott eredmények akár egyfajta folytatásaként is tekinthetők a korábbi műnek. Az a tény pedig, hogy a duális háromszögön történő bolyongást leíró Hamilton-operátor sajátértékeit egy iteratív módszerrel analitikusan meg lehet határozni [167, 168] újonnan megerősít minket abban, hogy ez legyen az elsőként bemutatott rendszer, mivel a többi gráf esetén ilyen egyszerű módszer egyelőre nem ismert az általunk használt mátrixok sajátértékeinek a meghatározására [169].

A rendszeren történő transzportfolyamatokat szeretnénk megvizsgálni, ehhez pedig a bevezetőben ismertetett klasszikus, illetve kvantum $P_0^c(t)$ illetve $P_0(t)$ visszatérési valószínűségeket (ld. (1.12) és (1.22)), illetve ezek átlagát, a $\bar{p}(t)$ illetve a $|\bar{\alpha}|^2$ mennyiségeket (ld. (1.15) és (1.27)) fogjuk elsőként megvizsgálni. Mint a bevezetőben is láttuk, ezek a mennyiségek a transzport sebességét jellemzik. Amennyiben a visszatérési valószínűség gyorsan lecseng, ak-

kor a transzport gyors, míg ha nem látunk erős lecsengést akkor a transzport lassú, sőt akár lokalizáció is lehet a rendszerben.

A spektrál dimenzióról megismerteknek megfelelően véletlen bolyongások esetén $P_0^c(t)$ és $\bar{p}(t)$ véges rendszerekre az $1/N$ egyensúlyi értékhez tart, és felfedezhetjük a $t^{-ds/2}$ lecsengést is. Ebből könnyen belátható, hogy ilyen rendszerre a bolyongás visszatérő, azaz a Pólya-féle szám $\mathcal{P} = 1$.

Kvantumos bolyongás esetén is a spektrum határozza meg a dinamikát, azonban nem a spektrál dimenzió, hanem az erősen degenerált sajátértékeken keresztül. Mint említettük, a spektrumot analitikusan ki lehet számítani minden g generációra, ekkor azt találjuk, hogy a sajátértékek majdnem harmadát két érték, a 3 és az 5 adja [139]. A $\rho(E)$ mennyiséget is analitikusan meg lehet határozni ezekre a sajátértékekre,

$$\rho(3) = \frac{1}{2 \times 3^g} (3^{g-1} + 3) \quad \text{és} \quad \rho(5) = \frac{1}{2 \times 3^g} (3^{g-1} - 1) . \quad (3.46)$$

A χ_{lb} időátlag is analitikusan felírható

$$\chi_{lb} = \frac{1}{3^{2g}} \left[3^g \left(1 + \frac{3^g}{14} \right) + \frac{10}{7} 2^g - \frac{3}{2} \right] \quad (3.47)$$

módon [139]. Mivel a fenti formulák analitikusak, így nem csak a generációnkénti viselkedés aszimptotikájából tudunk következtetni az egzakt, végtelen fraktált leíró mennyiségekre, hanem a $g \rightarrow \infty$ határértéket véve ezeket meg is határozhatjuk. Például

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \chi_{lb} = 1/14 \approx 0.0714 , \quad (3.48)$$

mely jól mutatja, hogy erős lokalizáció van a rendszerben, ugyanis az átlagos visszatérési valószínűség a végtelen rendszeren sem cseng le, hanem e körül az érték körül oszcillál. Ha megnézzük az időátlag (3.31) kiszámítási módját, akkor láthatjuk, hogy az erősen degenerált sajátértékek jelenléte hogyan tükröződik a lokalizációban.

A későbbiekben numerikus eszközöket fogunk használni, és egyre nagyobb generációjú gráfokat vizsgálva a keresendő mennyiségek aszimptotikáját fogjuk tanulmányozni. Az egzakt eredmények ismeretében tesztelhetjük, hogy mennyire ad pontos eredményt ez a módszer véges generációkra, mennyire gyors a konvergencia. Tekintsük elsőként a 3.1 táblázatot.

A táblázatban különböző generációkra láthatjuk a $\rho(3)$ és $\rho(5)$ degenerációt a (3.46) valamint a χ_{lb} időátlagot a (3.47) összefüggés alapján. A konvergencia nagyon szépen jelentkezik, a degenerációk esetében az $1/6 \approx 1,666 \dots$ valamint a χ_{lb} időátlag esetén az $1/14 \approx 0,0714 \dots$

g	$\rho(3)$	$\rho(5)$	χ_{lb}
2	$1/3 \approx 0.3333$	$1/9 \approx 0.1111$	0.2346
3	$2/9 \approx 0.2222$	$4/27 \approx 0.1481$	0.1221
4	$5/27 \approx 0.1852$	$13/81 \approx 0.1605$	0.0870
5	$14/81 \approx 0.1728$	$40/243 \approx 0.1646$	0.0763
6	$41/243 \approx 0.1687$	$121/729 \approx 0.1660$	0.0730
7	$122/729 \approx 0.1674$	$364/2187 \approx 0.1664$	0.0719
8	$365/2187 \approx 0.1669$	$1093/6561 \approx 0.1666$	0.0716

3.1. táblázat. A $\rho(E)$ degeneráció az $E = 3$ és $E = 5$ sajátértékekre, valamint a χ_{lb} időátlag a duális Sierpiński-háromszög különböző generációira.

határértéket négy jegy pontossággal megkaptuk, tehát véges gráfokból elegendő pontossággal tudunk következtetni a végtelen gráfot jellemző mennyiségekre. Térjünk most rá a csapdákkal ellátott gráf vizsgálatára. Mivel a korábbi analitikus eredményeink szerint a transzport nem hatékony a rendszerben, egy gerjesztés (bolyongó) megreked a gráf egy szegmensében, így azt várjuk, hogy a túlélési valószínűség a rendszer generációjának függvényében növekedni fog. Mint ahogy a 3.1 b. ábrán is láthatjuk, a gráfban 3 csúcspontba tettünk csapdákat két különböző módon: az 1-es indexszel jelzett esetben a gráf csúcsaiba, a 2-es indexszel jelölt esetben pedig az adottnál egyel kisebb generációkat összekötő csúcsokba. Ezután képeztük a (3.35) komplex Hamilton-operátort, majd numerikusan kiszámoltuk a sajátértékeit. A sajátértékek ismeretében meghatároztuk a Π_∞ aszimptotikus túlélési valószínűséget, eredményeinket a 3.2 táblázat mutatja. Az eredmények jól tükrözik várakozásainkat, a túlélési valószínűségek generációról generációra monoton növekvő sorozatot alkotnak, mutatva az erős lokalizációt a rendszerben.

A komplex, nem hermitikus Hamilton-operátor sajátértékeit már nem tudjuk egyszerű analitikus módszerekkel meghatározni, ezért numerikus eszközöket kell használnunk. Az eredményeinket bemutató publikáción közösen dolgoztam Anastasiia Anishchenkóval, a Freiburgi egyetem doktoranduszával. Csoportja korábbi publikációihoz [161, 162] kapcsolódóan csapdákkal ellátott rendszereket vizsgált. Eredményeit én is reprodukáltam, néhány esetben 1-2 %-kal pontosítottam is. A csapdákkal ellátott rendszereken ugyanis az aszimptotikus túlélési valószínűséget keressük, melynek (3.43) definícióját felidézve láthatjuk, hogy azon sajátértékek számát kell meghatároznunk, melyek tisztán valósak, azaz képzetes részük egzaktul nulla. Numerikusan egy mennyiségről eldönteni, hogy nulla vagy sem nem triviális: a numerikus hibák mellett

g	$\Pi_{\infty}^{(1)} = N_0^{(1)}/N$	$\Pi_{\infty}^{(2)} = N_0^{(2)}/N$
2	$1 / 9 \approx 0.111$	0
3	$9 / 27 \approx 0.333$	$6 / 27 \approx 0.222$
4	$43 / 81 \approx 0.531$	$36 / 81 \approx 0.444$
5	$165 / 243 \approx 0.679$	$150 / 243 \approx 0.617$
6	$571 / 729 \approx 0.783$	$540 / 729 \approx 0.741$
7	$1869 / 2187 \approx 0.855$	$1806 / 2187 \approx 0.826$

3.2. táblázat. A Π_{∞} aszimptotikus túlélési valószínűség a duális Sierpiński-háromszög $g = 2, 3, \dots, 7$ generációira. (1) eset: a csapdákat a csúcsokban helyeztük el; (2) eset: a csapdák a középső csúcsokban vannak (ld. 3.1 (b) ábra.)

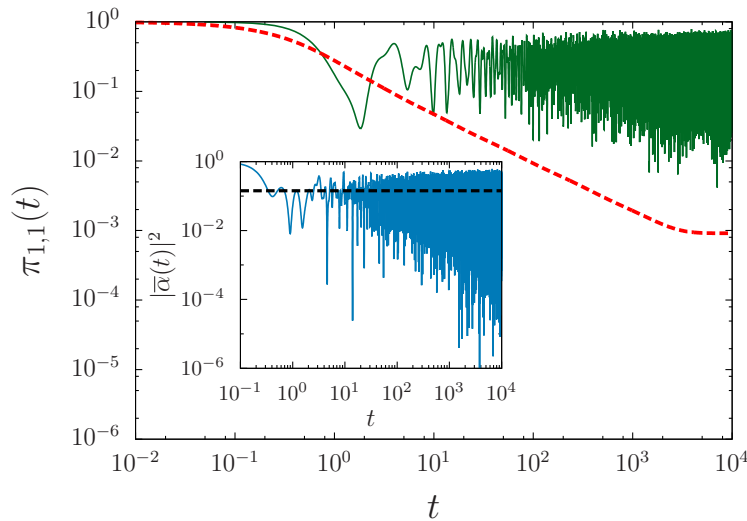
a lebegőpontos számábrázolás korlátait is figyelembe kell venni. A numerikus számolásoknál általában használt dupla (*double*) pontosság esetén maximum 15-16 jegyre kapjuk meg pontosan a számokat. Szakszerűbben ezt úgy mondhatjuk, hogy az $1.0 + \varepsilon = 1.0$ egyenlet fennáll a gépi kódban ha $\varepsilon < 2.2 \times 10^{-16}$ (az ε paramétert a számítástechnikában *machine epsilon*-nak nevezik [170]). Tehát dupla pontossággal nem lehetünk biztosak abban, hogy nincs 10^{-16} -nál kisebb képzetes rész, azt a program nagy eséllyel nullának fogja venni, mivel a nem nulla képzetes részek többségének nagyságrendje 1 körüli. Annak érdekében, hogy minél kisebb hibával meg tudjuk határozni a Π_{∞} aszimptotikus túlélési valószínűséget, átírtam a LAPACK programcsomag [171] `zgeev()` függvényét és az általa meghívott egyéb rutinokat úgy, hogy négyszeres pontossággal (*quadruple precision* [172]) lehessen használni a függvényt az erre a célra megírt FORTRAN kódban a mátrixok sajátértékeinek kiszámítására. Matematikailag természetesen ezzel a pontossággal is lehetnek persze nagyon kicsi, azaz 10^{-31} -nél kisebb nem nulla képzetes részek, de erre utaló jelet nem láttunk a spektrumokban. Nagyobb gráfokra azonban várhatóan még nagyobb numerikus pontosságra lenne szükség az adatok pontosabb kiértékeléséhez.

3.3. Sierpiński-háromszög

Következő rendszerünk a Sierpiński-háromszög. Erre, és a továbbiakban következő rendszerekre már nem ismerünk analitikus formulákat az általunk használt \mathbf{T} illetve a \mathbf{H} mátrixok sajátértékeinek meghatározására [169], ezért numerikusan számoltuk ki ezeket. Kis generációkra a teljes spektrumot meghatároztuk a MATLAB/GNU Octave programcsomagokban elérhető

$\text{eig}()$ illetve $\text{eigs}()$ függvényekkel, nagy generáció esetén azonban már csak azoknak a sajátértékeknek a degeneráltságát vizsgáltuk, melyek a kisebb generációkban jelentősnek mutatkoztak az $\text{eigs}()$ függvénnyel és a Lánczos algoritmus segítségével C++ nyelven [173]. Nagy gráfok esetén kihasználtuk azt, hogy a vizsgált mátrixok ritka mátrixok, így jelentősen csökkenteni lehetett a számításokhoz felhasznált időt és erőforrásigényt. Hasonló gráfokon történő diffúziós- és transzportfolyamatok spektrumát vizsgálták már, bizonyos határfeltételekkel analitikusan is megadhatóak a sajátértékek [124, 169], azonban az általunk használt mátrixok esetére ilyen módszer nem ismert.

A 3.3 ábrán elsőként a visszatérési valószínűségeket ábrázoltuk egy $g = 7$ generációs gráfra. A fő ábrán a csúcspontba történő klasszikus $p_{1,1}(t)$ visszatérési valószínűséget szaggatott (piros) vonallal, a $\pi_{1,1}(t)$ kvantumos visszatérési valószínűséget pedig folytonos (zöld) vonallal ábrázoltuk logaritmikus skálán.



3.3. ábra. A $\pi_{1,1}(t)$ visszatérési valószínűség a $j = 1$ csúcspontba (zöld folytonos vonal) valamint a kvantumos megfelelője (piros szaggatott vonal) egy $g = 7$ generációs Sierpiński-háromszögön. Kis ábra: az $|\bar{\alpha}(t)|^2$ alsó burkolója a $\bar{\pi}(t)$ átlagos visszatérési valószínűségnek a $g = 7$ generációs Sierpiński-háromszögön (kék folytonos vonal) és a χ_{lb} időátlag (fekete szaggatott vonal) mely körül oszcillál.

A két görbe közti különbség jól látható. A klasszikus esetben egy kezdeti időtartam után megjelenik a spektrál dimenzió szerinti $t^{-d_s/2}$ lecsengés, majd a rendszer véges mérete miatt az $1/N$ érték felé közeledve a lecsengés megáll, és a rendszer tart az egyensúlyi eloszláshoz. Kvantumos bolyongás esetén nem látunk ilyen erős spektrál dimenzió szerinti lecsengést, ehelyett ismét megjelenik a lokalizáció a rendszerben: a visszatérési valószínűség nem cseng le, hanem egy adott érték körül oszcillál, mely nagyobb $1/N$ -nél. A kis ábrán az $|\bar{\alpha}(t)|^2$ átlagos

visszatérési amplitúdót ábrázoltuk folytonos kék vonallal, valamint a χ_{lb} időátlagot szaggatott fekete vonallal. Itt is jól látható a lokalizáció, valamint az átlagos visszatérési amplitúdó oszcillációja a χ_{lb} időátlaga körül. A lokalizáció miatt kell lennie legalább egy erősen degenerált sajátértéknek, mely a (3.31) összefüggés alapján biztosítja, hogy az időátlag ne tartson nullához.

A Hamilton-operátor spektrumát megvizsgálva azt találjuk, hogy kellően nagy generációt véve a sajátértékek majdnem harmada azonos. Ezt a 3.3 táblázat mutatja a legjobban. Itt a $g = 2 - 9$ generációkra feltüntettük az $E = 6$ sajátértékhez tartozó $\rho(6)$ degenerációt, valamint a (3.31) egyenlet alapján számolt χ_{lb} időátlagot.

g	$\rho(6)$	χ_{lb}
2	0	0.2778
3	$3/15 = 0.2$	0.1378
4	$12/42 \approx 0.2857$	0.1179
5	$39/123 \approx 0.3171$	0.1296
6	$120/366 \approx 0.3279$	0.1374
7	$363/1095 \approx 0.3315$	0.1408
8	$1092/3282 \approx 0.3327$	0.1421
9	$3279/9843 \approx 0.3331$	0.1426

3.3. táblázat. A $\rho(E)$ degeneráció az $E = 6$ sajátértékre és a χ_{lb} időátlag a Sierpiński-háromszög különböző generációira.

A kapott eredmények azt mutatják, hogy a $\rho(6)$ degeneráció az $1/3$ értékhez tart g növelésével, valamint a harmadik generációtól kezdődően a χ_{lb} időátlagok is monoton növekvő sorozatot alkotnak. A spektrum részletes analízise is azt mutatja, hogy a rendszerben nem hatékony a transzport, hanem ismét a lokalizált állapotok dominálnak. Ezt a viselkedést a csapdákkal ellátott rendszeren meghatározott aszimptotikus túlélési viselkedéssel is tetten érhetjük. A 3.4 táblázatban különböző generációk esetén tüntettük fel a sarok illetve a középső csúcsokban csapdázott rendszeren található túlélési valószínűségeket. Jól látható, hogy az adatok ismét monoton növekvő sorozatot alkotnak, azaz egyre nagyobb a valószínűsége annak, hogy a bolyongó a rendszerben marad, és nem csapdázódik, azaz a transzport nem hatékony, vagyis a bolyongó nehezen jut el a csapdákhöz.

g	$\Pi_{\infty}^{(1)} = N_0^{(1)}/N$	$\Pi_{\infty}^{(2)} = N_0^{(2)}/N$
2	0	0
3	$4 / 15 \approx 0.27$	$1 / 15 \approx 0.067$
4	$21 / 42 = 0.5$	$15 / 42 \approx 0.357$
5	$82 / 123 \approx 0.67$	$70 / 123 \approx 0.569$
6	$285 / 366 \approx 0.78$	$261 / 366 \approx 0.713$
7	$934 / 1095 \approx 0.85$	$886 / 1095 \approx 0.809$

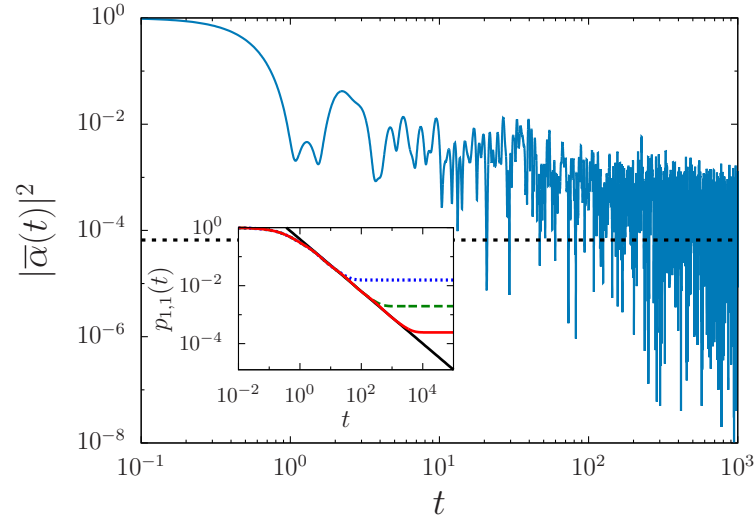
3.4. táblázat. A Π_{∞} aszimptotikus túlélési valószínűség a Sierpiński-háromszög $g = 2, 3, \dots, 7$ generációira. (1) Eset: a csapdák a csúcspontokban vannak, ezeket a helyeket rombuszokkal jeleztük a 3.1(a) ábrán. (2) Eset: a csapdákat a középső csúcspontokba tettük, ezeket az ábrán négyzetekkel jelöltük.

3.4. Duális Sierpiński-szőnyeg

A következő rendszer amit megvizsgáltunk a 3.1(d) ábrán látható duális Sierpiński-szőnyeg. Ilyen gráfokra a Laplace-mátrix spektruma és sajátfüggvényei a matematikusok részéről is érdeklődésre tartanak számot [174, 175], analitikus formula a sajátértékek felírására azonban jelenlegi ismereteim szerint még nem született. A rendszereken megfigyelhető fizikai mennyiségek is mint láttuk, nagyon szorosan kötődnek a spektrumhoz, így egyfajta támpontot is jelenthetnek a további kutatásokhoz.

A 3.4 ábrán a $|\bar{\alpha}(t)|^2$ átlagos visszatérési amplitúdót ábrázoltuk kék folytonos vonallal, valamint a χ_{lb} időátlagot szaggatott fekete vonallal a $g = 5$ generációs gráfra. Összehasonlítva a 3.3 ábrával, itt nem látunk erős lokalizációt, sőt a χ_{lb} időátlag is sokkal kisebb mint a korábbiakban. Nagyon erős lecsengést sem látunk, így pusztán a görbe alakjából nem tudjuk eldönteni, hogy mi történik nagyobb rendszereken, hol jelentkeznek a véges méretből adódó korrekciók. A 3.4 ábra kis ábráján a klasszikus bolyongásra jellemző $p_{1,1}(t)$ visszatérési valószínűséget ábrázoltuk a $g = 2, 3$ és 4 generációkra (kék, zöld, illetve piros görbék), valamint a $t^{-d_s/2}$ görbét (feketével), mely a spektrál dimenzió szerinti lecsengést jellemzi. Jól látható, hogy a klasszikus esetben jelentkezik a spektrál dimenzió szerinti lecsengés, valamint a véges méretből adódó korrekció is: a visszatérési valószínűség nem nullához tart, hanem az egyensúlyi eloszláshoz, hasonlóan az eddig bemutatott rendszerekhez.

Vizsgáljuk meg a \mathbf{T} mátrix spektrumát. A visszatérési amplitúdóban nem látunk erős lokalizációt. Ha a spektrumban találunk olyan E_m sajátértéket, melyre $\rho(E_m)$ nem tart nullához a



3.4. ábra. *Fő ábra:* Az $|\bar{\alpha}(t)|^2$ átlagos visszatérési amplitúdó egy ötödik generációs duális Sierpiński-szőnyegen (kék folytonos vonal), valamint az időátlaga (fekete szaggatott vonal). *Kis ábra:* a $p_{1,1}(t)$ klasszikus visszatérési valószínűség a $g = 2, 3$, és 4 generációs gráfra (pontozott (kék), szaggatott (zöld) ill. folytonos (piros) vonallal) valamint a lecsengésre illesztett $0.4 t^{-1.8/2}$ görbe a spektrál dimenzióknak megfelelően (egyenes fekete vonal).

generációk számát növelve, akkor elmondhatjuk, hogy a transzport nem hatékony, a bolyongó lokalizálódik. A spektrumban az $E = 3$ sajátérték mutat degenerációt, de nem olyan erőset mint a Sierpiński-háromszög és a duálisa esetén. Amennyiben visszatekintünk a 3.2 ábrára, akkor láthatjuk, hogy ez a spektrum sokkal egyenletesebb, és közelebb áll a kétdimenziós négyzetes rács spektrumához mint a háromszögekéhez. Ennek ellenére, ha megnézzük a 3.5 táblázatban szereplő $\rho(3)$ degenerációkat, akkor az adatok arra engednek következtetni, hogy nagyobb generációkra $\rho(3)$ bekonvergálhat 4.4×10^{-3} köré. Ha a táblázatban szereplő χ_{lb} időátlagokat nézzük, akkor azokban még nem látjuk a konvergenciát. Ez nem jelenti azt, hogy nem lehet. A lassabb konvergenciára az adhat magyarázatot, hogy itt egy olyan sajátérték van, ami erősen degenerált, szemben a korábban vizsgált rendszerekkel, ahol több olyan sajátérték is volt, ami ennél nagyobb mértékű degenerációt mutatott.

A csapdázott rendszert jellemző Π_∞ aszimptotikus túlélési valószínűségek a 3.6 táblázatban láthatóak a két különböző csapdázási elhelyezésre a Sierpiński-szőnyeg különböző generációira. A túlélési valószínűségek végesek, ami kvantumozott rendszerek esetén önmagában még nem elég érv a lokalizáció mellett. A Sierpiński-háromszögek esetén Π_∞ egy monoton növekvő sorozatot alkotott, és a legnagyobb vizsgált generációra 0.8 fölé ment az értéke. A most vizsgált Sierpiński-szőnyegre is növekednek az értékek, de lényegesen lassabban. Ez azt sugallja, hogy nagyobb generációkra a transzport kevésbé hatékony, de még mindig hatékonyabb mint

g	$\rho(3)$	χ_{lb}
2	$2 / 64 \approx 3.13 \times 10^{-2}$	2.44×10^{-2}
3	$4 / 512 \approx 7.81 \times 10^{-3}$	2.98×10^{-3}
4	$20 / 4096 \approx 4.88 \times 10^{-3}$	3.89×10^{-4}
5	$148 / 32768 \approx 4.52 \times 10^{-3}$	6.60×10^{-5}
6	$1172 / 262144 \approx 4.47 \times 10^{-3}$	—

3.5. táblázat. A $\rho(3)$ degeneráció az $E = 3$ sajátértékre és a χ_{lb} időátlag a duális Sierpiński-szőnyeg különböző generációira.

a háromszögek esetén. Véges Π_∞ érték a végtelen fraktálon azt jelentené, hogy véges annak a valószínűsége, hogy a bolyongó a rendszerben marad, de egyenletesen oszlik el. Ekkor mivel végtelen sok csúcsból áll a gráf, így az egy adott pontba való visszatérési valószínűség tarthat nullához, azaz nem beszélhetünk lokalizációról. Ahhoz, hogy lokalizációról beszélhessünk, az adott csapdaelrendezések mellett az aszimptotikus túlélési valószínűségnek növekednie kellene. A 3.6 táblázat adataiban látunk növekedést, azonban erre bizonyosan még nem mondhatjuk azt, hogy ez a lokalizáció miatt van.

g	$\Pi_\infty^{(1)} = N_0^{(1)} / N$	$\Pi_\infty^{(2)} = N_0^{(2)} / N$
2	$15 / 64 \approx 0.234$	$14 / 64 \approx 0.219$
3	$126 / 512 \approx 0.246$	$126 / 512 \approx 0.246$
4	$1030 / 4096 \approx 0.251$	$1030 / 4096 \approx 0.251$

3.6. táblázat. A Π_∞ aszimptotikus túlélési valószínűség a duális Sierpiński-szőnyeg $g = 2, 3$, és 4 generációira; az 1-es indexszel jelölt esetben a csapdák a 3.1(d) ábrának megfelelően a gráf csúcsaiban helyezkedtek el, míg a 2-es indexszel jelzett esetben a csapdák a középső pontokban voltak.

3.5. Sierpiński-szőnyeg

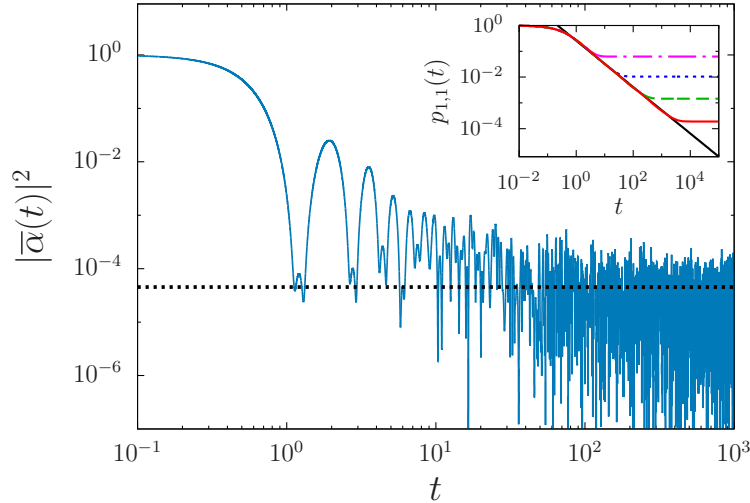
Utolsó vizsgált rendszerünk a 3.1(c) ábrán látható Sierpiński-szőnyeg. Érdekes egy kicsit alaposabban is áttanulmányozni a gráf struktúráját az első néhány generációban. Az első generáció egy négy csúcsból álló gyűrű. A második generációt ebből felépítve azt tapasztaljuk, hogy az gyakorlatilag egy 4×4 -es négyzetes rács, az ábrán szürke csíkos háttérrel jelzett részt csak mi látjuk, mert tudjuk, hogy fraktálként kell gondolni a rendszerre, de a bolyongó nem látja azt. A

harmadik generáció (ami az ábrán is látható) már eltér a négyzetes rácstól, azonban a negyedik generáció az, ahol feltűnik a fraktálra jellemző önhasonlóság a rendszerben, azaz a bolyongás dinamikájában számottevően itt várhatjuk a fraktálokra jellemző viselkedés megjelenését. Ez a gondolatmenet jól mutatja, hogy mennyivel nehezebb numerikusan vizsgálni a Sierpiński-szőnyegeket: a negyedik generációban a rendszert leíró Hamilton-operátor reprezentálásához már egy 688×688 -as mátrixra van szükségünk. Összehasonlításképp, a negyedik generációs Sierpiński-háromszög Laplace-mátrixa csak 42×42 -es, a gráf pedig a negyedik generációra nagyon szépen mutatja az önhasonlóságot.

Hasonlóan a duálisához, a Sierpiński-szőnyegre is ábrázoltuk a $|\bar{\alpha}(t)|^2$ átlagos visszatérési amplitúdót és a $p_{1,1}(t)$ visszatérési valószínűséget. A 3.5 ábra kis ábráján a gráf csúcsába való klasszikus visszatérési valószínűségeket láthatjuk a kettőtől ötödik generációs gráfokra, valamint a $t^{-d_s/2}$ görbét, mely a spektrál dimenzió szerinti lecsengést mutatja: nem túl kis és nem túl nagy időkre a görbék nagyon jól mutatják a hatványfüggvény szerinti lecsengést, tökéletesen fedik egymást, majd eléri az adott generációhoz tartozó egyensúlyi értéket. A kvantumos esetben $|\bar{\alpha}(t)|^2$ erős lecsengést mutat, majd eléri a χ_{lb} egyensúlyi értékét, és a körül oscillál. Összehasonlítva a görbét a korábbiakkal itt a leggyorsabb a kezdeti lecsengés, de ettől még lehet lokalizáció is a rendszerben. A kezdeti gyors lecsengés adódhat abból, hogy kis generációkra (a korábbi gondolatmenet alapján a negyedikig) nem igazán érvényesül az önhasonló szerkezet a gráfban, csak akkor kezdi el „érezni” a bolyongó a fraktál szerkezetet, amikor már eléggé eltávolodott az indulás helyéről. Magából az ábrából tehát ismét nem vonhatunk le egzakt következtetéseket arra vonatkozóan, hogy a végtelen gráfon χ_{lb} véges, vagy pedig nullához tart, de az jól látható, hogy a transzport sokkal hatékonyabb mint a Sierpiński-háromszögek esetén volt.

Az 1.16 egyenlettel definiált \mathbf{T} mátrix spektrumát megvizsgálva azt találtuk, hogy abban egy olyan sajátérték van, ami erősen degenerált, az $E = 4$ sajátérték. A különböző generációjú gráfokra számolt $\rho(4)$ degenerációkat a 3.7 táblázatban foglaltuk össze a spektrumokból számolt χ_{lb} időátlagokkal együtt. A χ_{lb} értékek nem mutatnak lokalizációt, a degenerációk viszont ismét arra utalnak, hogy lehet lokalizáció a rendszerben: az ötödik és a hatodik generációhoz tartozó $\rho(4)$ értékek eltérése ismét kicsi, hasonlóan a duális Sierpiński-szőnyegen kapott eredményekhez.

A vizsgált gráfok közül ez áll a legközelebb a kétdimenziós négyzetes rácshoz, ezért érdemes összehasonlítani a két rendszer spektrumát, hiszen mint azt a 3.2 ábrán is láttuk, a két



3.5. ábra. *Fő ábra:* Az átlagos visszatérési amplitúdó a hatodik generációs Sierpiński-szőnyegre (kék folytonos vonal), valamint a χ_{lb} időátlag (fekete szaggatott vonal). *Kis ábra:* A klasszikus visszatérési valószínűség a gráf csúcsába a $g = 2, 3, 4$, és 5 generációk esetén, valamint a d_s spektrál dimenzió szerinti lecsengés (fekete egyenes folytonos vonal).

g	$\rho(4)$	χ_{lb}
2	$3 / 16 \approx 1.88 \times 10^{-2}$	1.25×10^{-1}
3	$6 / 96 = 6.25 \times 10^{-2}$	1.89×10^{-2}
4	$8 / 688 \approx 1.16 \times 10^{-2}$	2.29×10^{-3}
5	$16 / 5280 \approx 3.03 \times 10^{-3}$	2.92×10^{-4}
6	$128 / 41584 \approx 3.08 \times 10^{-3}$	4.54×10^{-5}

3.7. táblázat. A $\rho(4)$ degeneráció az $E = 4$ sajátértékre és a χ_{lb} időátlag a Sierpiński-szőnyeg különböző generációira.

rendszer spektruma közel áll egymáshoz. Egy véges, $N \times N$ méretű négyzetes rácsra szintén az $E = 4$ sajátérték az, amelyik a legjobban degenerált, hasonlóan a Sierpiński-szőnyeghez. Mivel a négyzetes rácsról tudjuk, hogy az origóba való visszatérés valószínűsége nullához tart (ld. 3.1.2 alfejezet), így erre a rendszerre a $\rho(4)$ degenerációnak nullához kell tartania ha a rendszer méretét növeljük. Ez így is történik, elég nagy rendszerekre $\rho(4) \sim 1/N$. A 3.7 táblázat adataival összehasonlítva ez azt jelenti, hogy egy hasonló méretű négyzetes rácson az egyes generációkra számolt degenerációk aránya $\sqrt{8} \approx 2,83$ körüli érték lenne, míg a táblázatban az ötödik és a hatodik generációra kapott értékekre ez az arány 1,016. Ahhoz, hogy biztos állítást tudjunk mondani arra vonatkozóan, hogy van-e lokalizáció a rendszerben még nagyobb gráfokra kellene megvizsgálni a spektrumot. Ebben a rendelkezésünkre álló számítástechnikai

lehetőségek jelentették a fő korlátot. Az eddig bemutatott generációknál nagyobb gráf esetén a \mathbf{T} (és ugyanígy a \mathbf{H}) mátrix mérete $300\,000 \times 300\,000$ -nél nagyobb lenne, a jelenleg rendelkezésünkre álló eszközökkel pedig ekkora mátrixokat már nem tudtunk kezelni, annak ellenére sem, hogy kihasználtuk a mátrixok ritkaságát, és csak a spektrum egy részét számoltuk ki adott esetben, nem a teljeset. A nagyon nagy generációkkal való számolás esetén az algoritmus memória- és időigénye mellett egy másik lényeges korlátozó tényező is színre lép, mégpedig a numerikus hiba. Az eddig bemutatott fraktálok gráfjához rendelt Laplace-mátrixok spektruma korlátos, azaz a $[0, E_{\max}]$ intervallumban találhatóak a sajátértékek. Ha a gráf N csúcsot tartalmaz, akkor a hozzá tartozó Hamilton-operátornak N sajátértéke van. Ezek egymástól való távolságának nagyságrendje E_{\max}/N . Nagyobb generációk esetén az alkalmazott algoritmus műveletigénye a gráfban található csúcsok számával növekszik, ezzel együtt a numerikus hiba nagyságrendje is, így egyre kevesebb értékes jegyre tudjuk meghatározni a sajátértékeket. Ahhoz viszont, hogy eldönthessük, hogy egy adott sajátérték hányszorosan degenerált egyre több értékes jegyre lenne szükségünk, hiszen a sajátértékek egyre közelebb kerülnek egymáshoz.

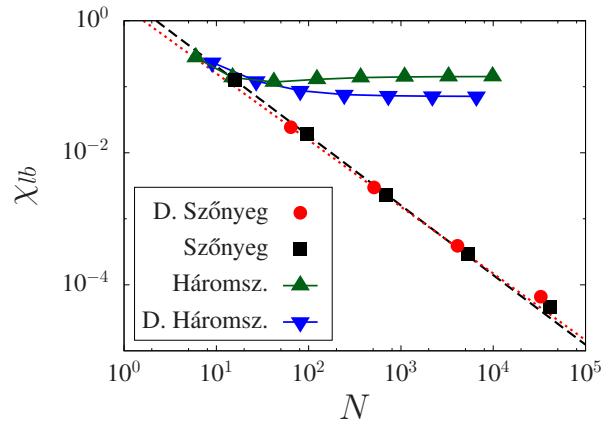
A csapdákkal ellátott rendszert is megvizsgáltuk, hasonlóan az eddigiekhez. Az aszimptotikus túlélési valószínűségeket a 3.1c ábrán látható elrendezésnek megfelelően határoztuk meg a csapdákat a csúcspontokban illetve a belső pontokban helyeztük el. A kapott eredmények nagyon hasonlítanak a duális Sierpiński-szőnyeg esetén kapott eredményekhez: lassú növekedést látunk, azonban ez nem elég meggyőző ahhoz, hogy egyértelműen állást foglalhassunk amellett, hogy van-e a rendszerben lokalizáció vagy sem. Ennek egyértelmű igazolásához magasabb generációs rendszereket kellene használnunk, melyet a jelenleg rendelkezésre álló számítási kapacitás nem tesz lehetővé.

g	$\Pi_{\infty}^{(1)} = N_0^{(1)}/N$	$\Pi_{\infty}^{(2)} = N_0^{(2)}/N$
2	$2 / 16 = 0.125$	$2 / 16 = 0.125$
3	$23 / 96 \approx 0.240$	$22 / 96 \approx 0.230$
4	$168 / 688 \approx 0.244$	$168 / 688 \approx 0.244$
5	$1314 / 5280 \approx 0.249$	$1314 / 5280 \approx 0.249$

3.8. táblázat. A Π_{∞} aszimptotikus túlélési valószínűség a Sierpiński-szőnyeg $g = 2, 3, 4$, és 5 generációira; az 1-es indexszel jelölt esetben a csapdák a 3.1(d) ábrának megfelelően a négyzet alakú gráf csúcsaiban helyezkedtek el, míg a 2-es indexszel jelzett esetben a csapdák a középső pontokban voltak.

3.6. Következtetések

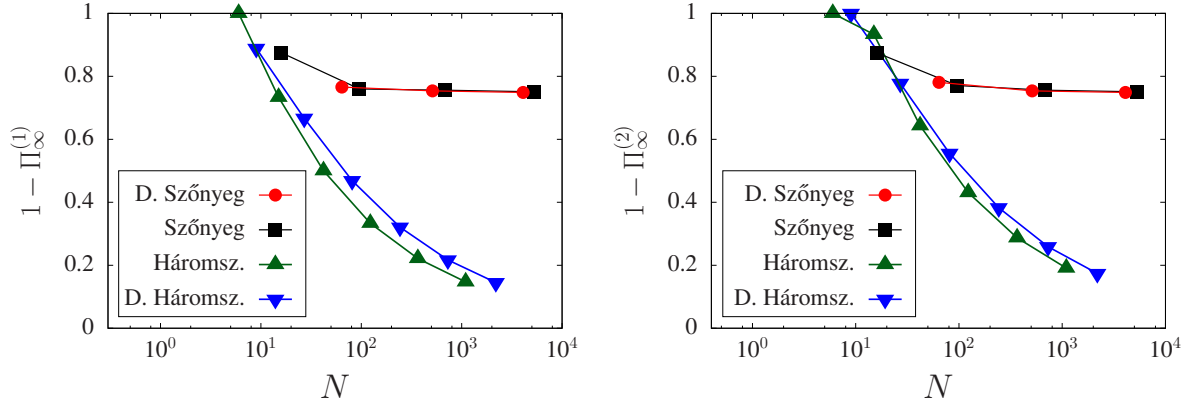
Sierpiński-fraktálokon történő folytonos idejű kvantumos bolyongások transzport tulajdonságait vizsgáltam. Elsőként a Sierpiński-háromszöget és ennek duálisát tekintettem. Ebben az esetben azt kaptam, hogy erős lokalizáció van a rendszerben, melyet a χ_{lb} időátlag konvergenciájában is láthatunk a g generáció növelésével. Az ezután megvizsgált Sierpiński-szőnyeg és a duális esetben nem tudunk ilyen határozott állítást tenni, numerikus eredményeinkben a χ_{lb} időátlag nem mutatott konvergenciát a megvizsgált hatodik generációig. Eredményeinket a 3.6 ábrán foglaltuk össze. Jól látható, hogy a gráf méretét növelve a Sierpiński-háromszög és a duális esetben erős lokalizációt látunk, míg a szőnyegekre lecseng a χ_{lb} időátlag. Ez a viselkedés a klasszikus rendszerekkel összehasonlítva is figyelemre méltó, ugyanis ott láttuk, hogy mindegyik gráf esetén a d_s spektrál dimenzió szerinti a lecsengés, sőt a két típusú fraktál spektrál dimenziója is elég közel áll egymáshoz, a háromszögekre $d_s \approx 1.365$ míg a szőnyegekre $d_s \approx 1.805$. A klasszikus bolyongás esetén a Sierpiński-háromszög és a duális esetben a χ_{lb} időátlag nullához tart, és $P_0^c(t)$ visszatérési valószínűség is, ráadásul azonos d_s szerinti lecsengéssel a háromszögre és a duálisára. Az általunk vizsgált kvantumos bolyongások esetén nem látunk lecsengést egyik háromszögre sem, sőt a $t \rightarrow \infty$ határesetben vett χ_{lb} időátlagok sem egyeznek meg a Sierpiński-háromszögre és a duálisára.



3.6. ábra. A χ_{lb} időátlag a vizsgált rendszerekre a gráfot alkotó csúcsok számának függvényében.

A vizsgált gráfok Laplace-mátrixának spektrumát is megvizsgáltuk, ugyanis klasszikus bolyongások esetén ez a \mathbf{T} mátrix, illetve a Hamilton-operátor egy \mathbf{H} mátrix reprezentációja a kvantumos bolyongásokra. A Sierpiński-háromszögek esetén a spektrum tükrözte a rendszeren tapasztalt lokalizációt, több erősen degenerált sajátérték is található a spektrumban. A

Sierpiński-szőnyegek esetén az általunk vizsgált generációk esetén még nehéz egyértelműen azt mondani, hogy a spektrumban vannak olyan sajátértékek, melyekre a $g \rightarrow \infty$ határesetben a $\rho(E)$ degeneráció véges marad. Az eredmények alapján ez lehetséges, azonban az egyértelmű kijelentéshez nagyobb gráfokat kellene vizsgálnunk. Jelen pillanatban ilyen hatalmas (legalább $300\,000 \times 300\,000$ méretű) mátrixokat nem tudunk numerikusan kezelni.

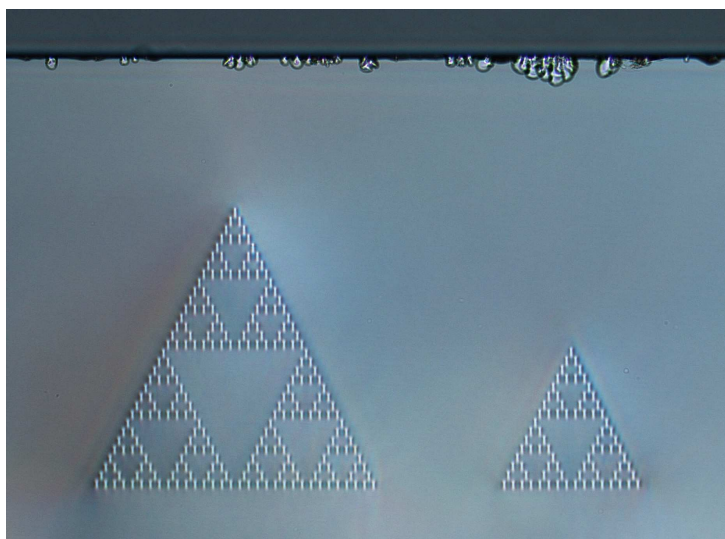


3.7. ábra. Annak a valószínűsége, hogy a bolyongó csapdázódik, azaz $1 - \Pi_\infty$ a vizsgált rendszerekre a gráfot alkotó csúcsok számának függvényében. Az 1-es indexszel jelölt esetben a csapdák a 3.1(d) ábrának megfelelően a gráf csúcsaiban helyezkedtek el, míg a 2-es indexszel jelzett esetben a csapdák a középső pontokban voltak.

Eredményeinket alátámasztják a csapdázott rendszereken meghatározott Π_∞ aszimptotikus túlélési valószínűség értékei is mindkét konfigurációban, nevezetesen amikor a csapdákat a gráfok csúcsaiban illetve a középső csúcsokban helyeztük el. Eredményeinket a 3.7 ábrán foglaltuk össze, ezen az aszimptotikus túlélési valószínűséget láthatjuk a gráfot alkotó csúcsok számának függvényében. A Sierpiński-háromszög és duálisa esetében láthatjuk, hogy annak a valószínűsége, hogy a bolyongó eljut a csapdához és ott csapdázódik nagyobb generációkra monoton csökken, ez is mutatja, hogy a háromszögeken a transzport nem túl hatékony. A Sierpiński-szőnyeg és duálisa esetében a csapdázási valószínűség nem csökken olyan erőteljesen mint a háromszögek esetén, azt mutatva hogy a transzport hatékonyabb ezeken a rendszereken.

Mint láthattuk, a T illetve H mátrixok spektruma mind a klasszikus, mind pedig a kvantum bolyongások esetén meghatározza a bolyongás általunk vizsgált tulajdonságait. Fontos különbség azonban, hogy míg a klasszikus bolyongások dinamikáját a spektrál dimenzió keresztül a spektrum alacsony energiájú része adja meg, addig a kvantum esetben a teljes spektrumot meg kell vizsgálni, ugyanis kvantumosan az erősen degenerált sajátértékek vezérlik a dinamikát. A sajátértékekhez tartozó lokalizált sajátértékeket ezen eredmények folytatásaként tervezzük megvizsgálni. Ha megnézzük azt, hogy a vizsgált fraktálokra hogy hány élet (illetve

csúcsot) kell elvonnunk a gráfból ahhoz, hogy egy eggyel kisebb generációjú önhasonló részt kivágjunk, akkor azt találjuk, hogy a Sierpiński-háromszögre két csúcs illetve a duálisára két él elvétele elég ehhez minden generációban (*finitely ramified fractal*). A Sierpiński-szőnyeg illetve a duálisa esetén az eltávolítandó élek (illetve csúcsok) száma a generációk számával együtt növekszik, és tart végtelenbe (*infinitely ramified fractal*) [154, 176, 177]. A Sierpiński-háromszögekre ez a tulajdonság biztosítja azt, hogy vannak lokalizált sajátállapotok [124]. A Sierpiński-szőnyeget meg lehet konstruálni úgy is, hogy véges él elvágásával megkapjunk belőle egy önhasonló részt [178, 179]. Elsődleges eredményeim azt mutatják, hogy ilyen Sierpiński-szőnyegeken sokkal erősebben jelentkezik a lokalizáció, és analitikusan be lehet látni, hogy van erősen degenerált sajátérték. Ezen vizsgálatok közelebb vihetnek az általános Sierpiński-szőnyegek analitikus vizsgálatához.



3.8. ábra. A negyedik és ötödik generációs Sierpiński-háromszögeknek megfelelő struktúra egy kristályban [180].

Mint a bolyongásokról szóló bevezetőben említettem, a folytonos idejű kvantum bolyongások egyik lehetséges kísérleti megvalósítási területe az evanescensen csatolt optikai hullámvezetők alkalmazása [86, 87]. Az ebben a fejezetben bemutatott eredmények összefoglalásaként, valamint a kutatás motivációjaként elmondhatom, hogy a rendelkezésemre álló információk szerint a dolgozat megírásakor Prof. Alexander Szameit vezetésével a jénai Friedrich Schiller Egyetemen aktívan kutatják a Sierpiński-fraktálokra történő folytonos idejű kvantum bolyongások kísérleti megvalósítását ilyen hullámvezetőkben. A 3.8 ábrán egy ilyen kristályt láthatunk [180], melyben a hullámvezetők keresztmetszeti képe kirajzolja a negyedik és ötödik generációs Sierpiński-háromszöget. Ha feltesszük, hogy az ábra síkja az $x - y$ sík, akkor

a bolyongónak megfelelő fény terjedési iránya a z tengellyel párhuzamos, ebben az irányban találhatóak a hullámvezetők, így tehát a z irányú terjedés felel meg az időfejlődésnek. Ezt úgy kell érteni, hogy a kristály egyik oldalán, mondjuk egy háromszög egyik csúcsában elindítjuk a bolyongót, majd a kristály másik oldalán lemérjük az egyes hullámvezetőkben lévő intenzitásokat, melyek a kristály hosszából kiszámítható idővel későbbi állapotot mutatják.

II. rész

Bose-Einstein kondenzátum és nanovezető csatolása

4. fejezet

Irodalmi áttekintés

Az elmúlt időszakban a hibrid kvantummechanikai rendszerek az elméleti és kísérleti kutatások élvonalába kerültek [40]. Ez részben annak is köszönhető, hogy a rendszereket alkotó komponensek a kiterjedt elméleti leírás mellett, kísérletileg is jól kontrollálhatóvá váltak. A különböző nanoméretű oszcillátorok [181, 182] megvalósítása például olyan szintre ért, hogy segítségükkel akár atomi nagyságrendű tömegeket is lehet mérni [183, 184]. Nanomechanikai oszcillátorokhoz csatolhatjuk egy optikai rezonátor egy módusát (például egy membránon történő fényvisszaverődést kihasználva [185, 186]), így optomechanikai csatolást létrehozva a két rendszer között [187, 188]. Az optomechanikai rendszereknek gyakorlati alkalmazása lehet például, hogy ultrahideg atomokat egy membránhoz csatolva azt hűteni tudjuk [185, 189].

Az optomechanikai csatolás mellett lehetséges más kölcsönhatást is alkalmazni, például a van der Waals típusú erőket, melyek akkor lépnek fel, amikor a két rendszer közti távolság nagyon kicsi [190–192]. Ultrahideg atomok felhőjét egy grafén membránhoz közelítve például a fellépő kölcsönhatás a membrán fodrozódását idézi elő [193].

Lehetséges mágneses kölcsönhatással is csatolni kvantumrendszereket, például egy mechanikai oszcillátort az elektron spinjéhez gyémántban létrehozott vakanciában [194].

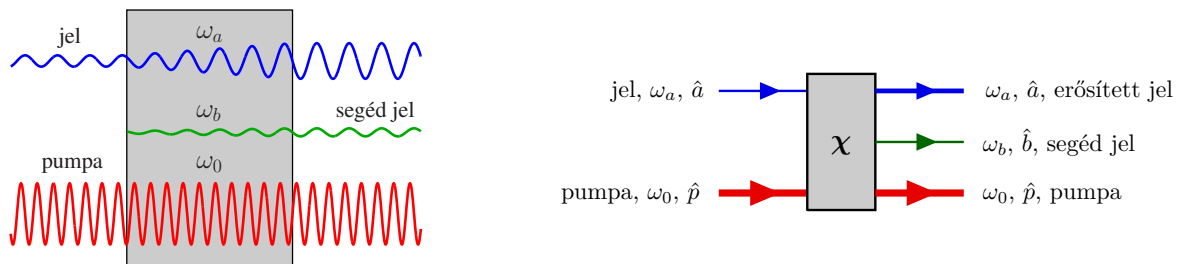
A mágneses csatolás esetén gyakran alkalmaznak Bose-Einstein kondenzátumot (BEC) hibrid kvantumrendszerekben, mert a kondenzátum nagyon érzékeny a külső mágneses terekre, valamint ezáltal a rendszer paramétereit is hangolhatjuk [195, 196]. Ilyen magnetomechanikai csatolást már elméletileg és kísérletileg is vizsgáltak Bose-Einstein kondenzátum és egy mágnesezett konzol között [42, 197–199]. Permanens mágnesek helyett használhatunk például egy áramvezető szén nanocsövet. Egy ilyen elrendezés alkalmas lehet arra, hogy az áramok keltette mágneses tér segítségével hozzuk létre a Bose-Einstein kondenzátum csapdázásához szüksé-

ges mágneses teret [200, 201], vagy a nanocsövet megrezgetve a kondenzátumból kigerjesztett atomok számából következtessünk a nanocsőben folyó kvantált áram karakterisztikus tulajdonságaira [45].

A lézerek alkalmazásában széles körben használják az optikai parametrikus erősítést különböző jelek erősítésére [202–205]. Parametrikus folyamatokat más fizikai rendszerben is használnak, például a vákuum fluktuációk felerősítésére kondenzátumban [206], vagy egy szén nanocső amplitúdójának erősítésére klasszikus pumpálást alkalmazva [207, 208].

A dolgozat ezen részében egy Bose-Einstein kondenzátumból és nanoméretű áramvezetőből álló hibrid kvantumrendszerben fogom felírni a csatolást, és megmutatni, hogy ez a nanovezeték rezgési amplitúdójának parametrikus erősítésére vezet. Ehhez a következő fejezetben tekintsük át az optikai parametrikus erősítés alapjait, mely egyfajta analógiaként szolgálhat a későbbi eredmények megértéséhez.

4.1. Parametrikus erősítés bemutatása



4.1. ábra. Parametrikus erősítés modellje egy nemlineáris kristályban, melyben a polarizáció nemlineárisan függ a fény elektromos mezejétől. A bal oldali ábrán a klasszikus, a jobb oldalin pedig a kvantumos eset vázlata látható. A kristályt egy erős lézerrel megvilágítjuk, ez a pumpa (*pump*), valamint rákapcsoljuk az erősíteni kívánt jelet (*signal*). A háromhullámú keverés során visszkapjuk a (kissé gyengített) pumpa módust, megkapjuk az erősített jelet, valamint keletkezik egy segéd (*idler*) módus [53].

A parametrikus erősítés, mint azt a neve is mutatja, alapvetően egy adott jel erősítésére alkalmazható. A legegyszerűbb modellben a bemeneti oldalon található az erősíteni kívánt jel, például egy fénycsugár, valamint a pumpa, ami lehet egy erős lézer egy nemlineáris kristály esetén. Egy olyan közegben, ahol harmadrendű nemlinearitás jelenik meg, a háromhullámú

keverés (*three-wave mixing*) is ilyen folyamatra vezet [53]. A Maxwell-egyenleteket felírva a frekvenciák között fennáll az

$$\omega_0 = \omega_a + \omega_b \quad (4.1)$$

összefüggés, csakúgy mint a most tárgyalt kvantumos esetben. A rendszer Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hbar\omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hbar\chi \left(\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{p} + \hat{a} \hat{b} \hat{p}^\dagger \right), \quad (4.2)$$

melyben a csatolást az utolsó tag írja le: az $\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{p}$ tag azt jelenti, hogy a kristályban a $\hbar\omega_0$ energiájú fotonból keletkezik egy $\hbar\omega_a$ és egy $\hbar\omega_b$ energiájú foton, az $\hat{a} \hat{b} \hat{p}^\dagger$ tag esetén pedig fordítva, egy $\hbar\omega_a$ és egy $\hbar\omega_b$ energiájú fotonból keletkezik egy $\hbar\omega_0$ energiájú. Elég nagy intenzitású lézer esetén alkalmazhatjuk azt a közelítést, hogy a lézert leíró mező teljes fotonszáma olyan nagy, hogy az abból eltüntetett fotonok száma elhanyagolható a teljes fotonszámhoz képest. Ekkor a mezőt nem tekintjük dinamikai változónak, és egy klasszikus térrel közelíthetjük

$$\hat{p} \rightarrow \mathcal{A} e^{-i\omega_0 t} \quad \mathcal{A} \in \mathbb{R} \quad (4.3)$$

módon. Ezzel a Hamilton-operátor alakja

$$\hat{H} = \hbar\omega_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hbar\eta \left(\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger e^{-i\omega_0 t} + \hat{a} \hat{b} e^{i\omega_0 t} \right), \quad (4.4)$$

ahol bevezettük az η csatolási állandót, ebbe foglaltuk bele a pumpáló tér amplitúdóját is. Térjünk át mindkét módus esetében egy $\omega_0/2$ körfrekvenciájú forgóhullámú képbe, valamint vezessük be a $\delta_a = \omega_a - \omega_0/2$ illetve $\delta_b = \omega_b - \omega_0/2$ frekvenciákat. Így az alábbi Hamilton-operátort kapjuk,

$$\hat{H} = \hbar\delta_a \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\delta_b \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hbar\eta \left(\hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{a} \hat{b} \right). \quad (4.5)$$

Ez első ránézésre nem őrzi meg az energiát, mivel az utolsó tagban csak keltő- illetve eltüntető operátorokat szorzunk össze, mintha egyszerre keltenénk illetve tüntetnék el két fotont. Ezt feloldja az, ha felidézzük, hogy a csatolási állandóban elrejtettük a klasszikusnak tekintett pumpát, amiből a rendszer energiát nyel el. A kapott Hamilton-operátort felhasználva a rendszer dinamikáját megadó Heisenberg-egyenletek a

$$\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}] = -i\delta_a \hat{a} - i\eta \hat{b}^\dagger, \quad \frac{d}{dt} \hat{b}^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{b}^\dagger] = i\delta_b \hat{b}^\dagger + i\eta \hat{a}, \quad (4.6)$$

alakban írhatóak, ahol a kihasználtuk a keltő- és eltüntető operátorok $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}$ jól ismert

kommutációs relációját. A két egyenletet mátrixos leírásban egyesítve

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} = -i \overbrace{\begin{pmatrix} \delta_a & \eta \\ -\eta & -\delta_b \end{pmatrix}}^{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

A (4.7) egyenlet megoldása az $e^{-i\mathbf{M}t}$ mátrixfüggvényre vezet, ebből pedig látható, hogy exponenciálisan felfutó megoldás akkor lesz, ha van olyan λ sajátértéke az \mathbf{M} mátrixnak, aminek a képzetes része pozitív, azaz $\text{Im } \lambda > 0$. Az egyszerűség kedvéért vizsgáljuk a degenerált esetet, amikor $\omega_a = \omega_b = \omega_0/2$ (ebből nem következik, hogy $\hat{a} = \hat{b}$), ekkor $\delta_a = \delta_b = 0$, a sajátértékegyenlet pedig

$$\lambda^2 + \eta^2 = 0, \quad \text{ebből} \quad \lambda_{1,2} = \pm i\eta. \quad (4.8)$$

Látható, hogy veszteségek hiányában bármilyen kis csatolásra van erősítés, és az η csatolási állandó írja le az exponenciális felfutás sebességét. A fenti mozgásegyenleteket analitikusan is meg lehet oldani [209], ekkor

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) \cosh(\eta t) - i\hat{a}^\dagger(0) \sinh(\eta t), \quad (4.9)$$

ahol a hiperbolikus függvényekben jelenik meg a csatolási állandó szerinti exponenciális növekedés.

Csillapított rendszer

Az előző pontban láttuk, hogy az ideális, veszteségmentes rendszerben bármilyen kis csatolási állandó esetén fellép a parametrikus erősítés. Valós rendszerekben ahhoz, hogy nettó erősítést kapjunk, az erősítésből származó nyereségnek kompenzálnia kell a veszteségeket. Ez azzal jár, hogy a csatolási állandónak lesz egy küszöbértéke, mely alatt nem tudjuk a kívánt módon erősíteni a jelet. Intuitív módon fel is tudjuk írni a küszöböt: amikor a pumpálásból származó energia épp kompenzálja a veszteségeket, akkor értük el a kritikus pumpálást, és a kritikus csatolási erősséget.

Az általunk vizsgált modellben a veszteségek a módusok csillapodásából származnak, melyeket csillapított harmonikus oszcillátorokként modellezhetünk. Jelölje κ az erősített, γ pedig a segéd módus csillapítási tényezőjét. A rendszer dinamikáját meghatározó Heisenberg–

Langevin-egyenletek

$$\frac{d}{dt}\hat{a} = (-i\delta_a - \kappa)\hat{a} - i\eta\hat{b}^\dagger + \hat{f}_a, \quad \frac{d}{dt}\hat{b}^\dagger = (i\delta_b - \gamma)\hat{b}^\dagger + i\eta\hat{a} + \hat{f}_b, \quad (4.10)$$

alakúak, ahol az \hat{f}_a illetve \hat{f}_b zaj operátorokra teljesül [210], hogy

$$\langle \hat{f}_a \rangle = \langle \hat{f}_b \rangle = 0, \quad (4.11)$$

$$\langle \hat{f}_a(t)\hat{f}_a^\dagger(t') \rangle = 2\kappa(\bar{n}_a + 1)\delta(t - t'), \quad \langle \hat{f}_b(t)\hat{f}_b^\dagger(t') \rangle = 2\gamma(\bar{n}_b + 1)\delta(t - t'). \quad (4.12)$$

A (4.10) egyenleteket az előző ponthoz hasonlóan egyesítve

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} = -i \overbrace{\begin{pmatrix} \delta_a - i\kappa & \eta \\ -\eta & -\delta_b - i\gamma \end{pmatrix}}^{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{f}_a \\ \hat{f}_b^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Az egyenlet homogén részét kielégíti a $\mathbf{G}(t)$ Green-függvény [211], melyet jelen esetben könnyen meghatározhatunk,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{G} = -i\mathbf{M}\mathbf{G} \quad \text{ebből} \quad \mathbf{G}(t) = e^{-i\mathbf{M}t}. \quad (4.14)$$

A Green-függvény segítségével az operátorok időfejlődése

$$\begin{bmatrix} \hat{a}(t) \\ \hat{b}^\dagger(t) \end{bmatrix} = \mathbf{G}(t) \begin{bmatrix} \hat{a}(0) \\ \hat{b}^\dagger(0) \end{bmatrix} + \int_0^t \mathbf{G}(t - \tau) \begin{bmatrix} \hat{f}_a(\tau) \\ \hat{f}_b^\dagger(\tau) \end{bmatrix} d\tau, \quad (4.15)$$

melyet az \hat{a} operátorra tagonként kiírva

$$\hat{a}(t) = G_{aa}(t)\hat{a}(0) + G_{ab}(t)\hat{b}^\dagger(0) + \int_0^t [G_{aa}(t - \tau)\hat{f}_a(\tau) + G_{ab}(t - \tau)\hat{f}_b^\dagger(\tau)] d\tau. \quad (4.16)$$

Az erősítés feltétele ismét az, hogy legyen olyan λ sajátértéke az \mathbf{M} mátrixnak, amire $\text{Im } \lambda > 0$. Vegyük azt az esetet, amikor $\omega_a = \omega_b = \omega_0/2$ azaz $\delta_a = \delta_b = 0$, ekkor a sajátértékegyenletet felírva

$$\lambda^2 + i\lambda(\kappa + \gamma) + (\eta^2 - \kappa\gamma) = 0, \quad (4.17)$$

ebből $\eta^2 > \kappa\gamma$ az exponenciálisan felfutó megoldás feltétele – mely megfelel a várakozásainknak is – az, hogy a pumpálásból származó nyereségnek kompenzálnia kell a veszteségeket. A kapott formula összhangban van a klasszikus háromhullámú keverés esetében kapott ered-

ménnyel [53]. A kritikus csatolási erősséget akkor érjük el, amikor átlépjük a

$$\eta_{\text{th}} = \sqrt{\kappa\gamma}, \quad (4.18)$$

küszöb (*threshold*) értéket, azaz éppen kompenzáljuk a veszteségeket. Ennél nagyobb csatolási állandó már parametrikus erősítésre vezet.

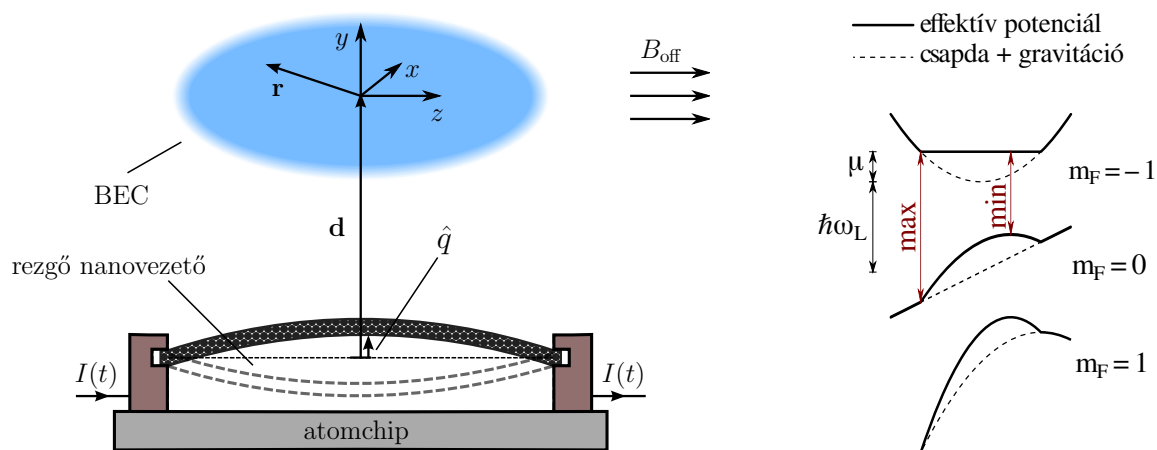
Az általunk vizsgálni kívánt hibrid kvantumrendszerben is megfigyelhető a vázolt kétmódusú rendszerrel vett analógia. A fenti modellben a pumpát egy klasszikus térrel modelleztük, és az \hat{a}, \hat{b}^\dagger operátorok időfejlődését néztük, ami megfelel annak, hogy a lézer kiürülését elhanyagoljuk. A következőkben látni fogjuk, hogy a mi esetünkben a Bose-Einstein kondenzátum fog energiát átadni a rezgő nanovezetéknek, és a kondenzátumról tesszük majd fel, hogy a kiürülése elhanyagolható a vizsgált időtartam alatt. Ezt a közelítést a Gross-Pitaevskii egyenletet kielégítő $\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r})$ hullámfüggvénnyel fogjuk elvégezni, a másodkvantált téroperátort $\hat{\psi}_{-1}(\mathbf{r}, t) \approx \exp(-i\mu't/\hbar)\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r})$ módon közelítve. A két oszcillátort leíró \hat{a} és \hat{b}^\dagger operátorokkal pedig a nanovezetéket leíró \hat{a} és a kondenzátumból gerjesztett atomokhoz tartozó $\hat{\psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t)$ operátorok állíthatók majd párhuzamba.

5. fejezet

Parametrikus erősítés BEC-nanovezeték hibrid rendszerben

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy egy Bose-Einstein kondenzátum és egy rezgő, áramjárta nanovezeték magnetomechanikai csatolása hogyan vezet a nanovezeték mechanikai rezgésének parametrikus erősítésére [III].

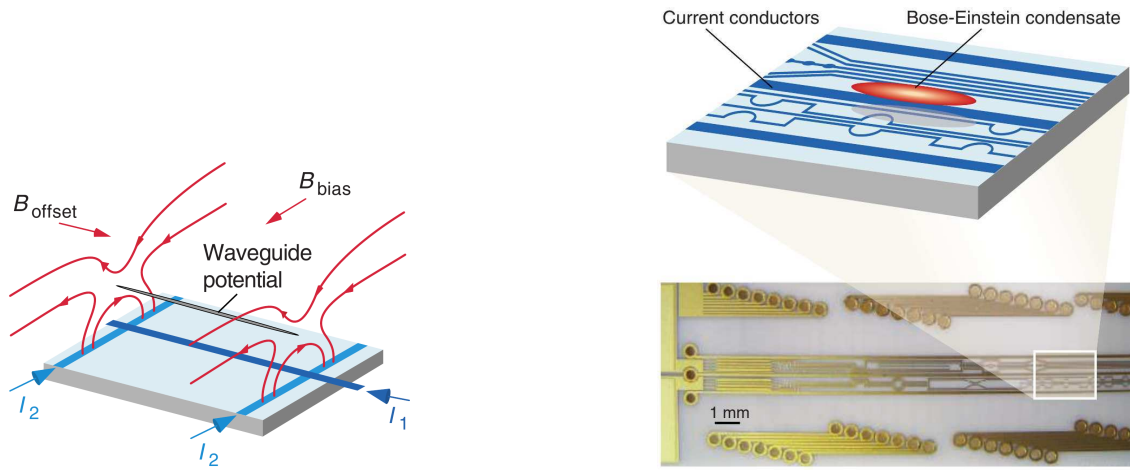
5.1. A rendszer modellezése



5.1. ábra. Az atomchipre rögzített nanovezető és az atomchip segítségével csapdázott Bose-Einstein kondenzátum modellje, valamint a csapda- és gravitációs potenciálok (lásd 5.2.2. fejezet).

Az általunk vizsgált rendszer vázlatos modellje az 5.1 ábrán látható. A rendszer lelke egy atomchip, ezen van rögzítve a nanoméretű áramvezető, a chipben futó elektródák keltette mág-

neses tér segítségével pedig csapdázzuk a kondenzátumot [212–216]. Az atomchip működési elve és egy példa a 5.2 ábrán látható. Modellünkben ^{87}Rb atomokat használtunk, melyek az $F = 1, m_F = -1$ hiperfinom állapotban vannak csapdázva. A mágneses tér domináns komponense egy homogén B_{off} (*offset*) tér a z irányban, az \hat{F}_z spinkomponens sajátállapotait ($m_F = -1, 0, 1$) ez a tér tolja el egymástól a Zeeman-effektus révén [8]. A homogén tér mellett található még egy gyenge inhomogén mágneses tér is, mely egy ellipszoid alakú potenciált eredményez a teljes mágneses tér minimuma körül. Ez a harmonikus csapdapotenciál egy ellipszoid alakú kondenzátumot eredményez.



5.2. ábra. *Bal oldali ábra:* Az atomchip modellje. Az I_1 áramot szállító (sötétkék) vezető kelt egy cirkuláris mágneses teret, ehhez a B_{bias} teret hozzáadva egy vonal mentén az eredő mágneses tér nulla lesz. A vezetővel párhuzamos B_{offset} tér biztosítja hogy a radiális vonzás harmonikus legyen, az I_2 áramot szállító vezető (világos kék) pedig bezárja a csapdázó teret [214]. *Jobb oldali ábra:* A teljes atomchip képe. Forrás: J. Fortágh, C. Zimmermann, *Toward Atom Chips*, Science, 307, 850 (2005).

A csoportunk által korábban publikált galvanométer elrendezésben [45] a nanocsőben folyó áramra kvantummechanikai operátorként tekintettek. Az általam vizsgált modellben konstans, klasszikus áramot tételezünk fel, melynek egyik fő oka az, hogy – mint a későbbiekben látni fogjuk – a parametrikus erősítéshez szükséges küszöböt csak relatíve nagy áramerősségek esetén lépjük át.

5.1.1. A kondenzátum leírása

Az egyrészecskés potenciál a csapdázó térből és a B_{off} térből tevődik össze,

$$V_m(\mathbf{r}) = g_F \mu_B \hat{\mathbf{F}} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = -m V_T(\mathbf{r}) + g_F \mu_B m B_{\text{off}}, \quad m \in \{-1, 0, 1\}, \quad (5.1)$$

ahol $g_F = -1/2$ a Landé-faktor, μ_B a Bohr-magneton, az $\hat{\mathbf{F}}$ atomi spint pedig \hbar egységekben mérjük [217]. A $V_T(\mathbf{r})$ a csapdázó térből származó alábbi ellipszoid alakú potenciált jelöli

$$V_T(\mathbf{r}) = \frac{M}{2} [\omega_r^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] , \quad (5.2)$$

ahol M egy rubídium atom tömege, ω_r illetve ω_z pedig a transzverzális és longitudinális csapdafrekvenciák [218]. Megjegyezzük, hogy $V_m(\mathbf{r})$ csak az $m_F = -1$ spinállapotú atomokra jelent bezáró potenciált, ezért csak ezek az atomok csapdázódnak. A kondenzátum és a gerjesztéseinek leírásához vezessük be a $\hat{\Psi}_m(\mathbf{r}, t)$ illetve a $\hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t)$ eltüntető- illetve keltő operátorokat, melyek az \mathbf{r} helyen a t időben eltüntetnek illetve keltenek egy bozont az $|F = 1, m_F = m\rangle$ állapotban, ahol az általunk vizsgált esetben m a $-1, 0, 1$ értékeket veheti fel [218, 219]. Ezen operátorok segítségével a kondenzátumot és gerjesztéseit egy spinor térrel írjuk le [220, 221], melynek matematikai alakja

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \hat{\Psi}_{-1}(\mathbf{r}, t) \\ \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) \\ \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \hat{\Psi}_{-1} |-1\rangle + \hat{\Psi}_0 |0\rangle + \hat{\Psi}_1 |1\rangle = \sum_{m=-1}^1 \hat{\Psi}_m |m\rangle . \quad (5.3)$$

A másodkvantált Hamilton-operátort

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{at}} = & \sum_{m, m'=-1}^1 \langle m | \int d^3r \hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + \sum_{m''=-1}^1 V_{m''}(\mathbf{r}) |m''\rangle \langle m''| + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{k, l=-1}^1 \langle k | g_{l, m'}^{m, k} \hat{\Psi}_k^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}, t) |l\rangle \right) \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}, t) |m'\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

módon írhatjuk fel [219], ahol a zárójelben lévő első tag a kinetikus energiát, a második a külső terektől származó (5.1) potenciált, míg az utolsó tag a kondenzátumban lévő atomok közti ütközést írja le. A következőkben ezeket a tagokat fogjuk részletesen kiértékelni.

A számítások során a $\hat{\Psi}_1(\mathbf{r}, t)$ komponenst elhanyagoljuk. Ezt azért tehetjük meg, mert az $m = -1$ alnívót csapdázzuk, és az $m = 0$ alnívóra fogunk atomokat gerjesztetni. Ezek a gerjesztett atomok nem csapdázódnak, hanem elhagyják a csapdát. Feltételezzük, hogy ez elég gyorsan megtörténik ahhoz, hogy az erről a nívóról történő további gerjesztéseket elhanyagoljuk. Nézzük most meg a Hamilton-operátor tagjait egyenként.

Az első, az atomok kinetikus energiáját leíró tagot kifejtve

$$\begin{aligned}
& \sum_{m,m'=-1}^1 \langle m | \int d^3r \hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} \right) \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}, t) | m' \rangle = \\
& = \int d^3r \left(\hat{\Psi}_{-1}^\dagger; \hat{\Psi}_0^\dagger; 0 \right) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\Psi}_{-1} \\ \hat{\Psi}_0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
& = \int d^3r \left[\hat{\Psi}_{-1}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} \right) \hat{\Psi}_{-1}(\mathbf{r}, t) + \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} \right) \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (5.5)
\end{aligned}$$

A második, az egyrészeszkés potenciális energiából származó tag is rövid számolás után megkapható, konkrét alakja

$$\sum_{m,m'=-1}^1 \langle m | \int d^3r \hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(\sum_{m''=-1}^1 V_{m''} | m'' \rangle \langle m'' | \right) \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}, t) | m' \rangle = \int d^3r \hat{\Psi}_{-1}^\dagger(\mathbf{r}, t) V_{-1}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{-1}(\mathbf{r}, t). \quad (5.6)$$

A kétrészeszkés potenciális energiát leíró harmadik tagnál feltesszük, hogy az ütközések olyanok, hogy $g_{l,m}^{m,k} = \delta_{l,m} \delta_{k,m'} g_s$, azaz $g_{l,m}^{m,k}$ diagonális, a g_s csatolási állandó [219] értéke pedig

$$g_s = \frac{4\pi \hbar^2 a_s}{M}, \quad (5.7)$$

ahol $a_s = 5.4$ nm, az s-hullámú szórási hossz rubídiumra [222], M pedig egy rubídium atom tömege. Ezzel a közelítéssel a képletben alkalmazott kettős összegzés jelentősen leegyszerűsödik,

$$\sum_{k,l=-1}^1 \langle k | g_{l,m'}^{m,k} \hat{\Psi}_k^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}, t) | l \rangle = \sum_{k,l=-1}^1 g_s \delta_{l,m} \delta_{k,m'} \langle k | \hat{\Psi}_k^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_l(\mathbf{r}, t) | l \rangle = g_s \langle m' | \hat{\Psi}_{m'}^\dagger \hat{\Psi}_m | m \rangle. \quad (5.8)$$

Ekkor az atomok ütközéséből jövő járulék a

$$\begin{aligned}
& \sum_{m,m'=-1}^1 \langle m | \int d^3r \hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(\frac{1}{2} \sum_{k,l=-1}^1 \langle k | g_{l,m'}^{m,k} \hat{\Psi}_k^\dagger \hat{\Psi}_l | l \rangle \right) \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}, t) | m' \rangle = \\
& = \frac{g_s}{2} \int d^3r \sum_{m,m'=-1}^1 \langle m | \langle m' | \hat{\Psi}_m^\dagger \hat{\Psi}_{m'}^\dagger \hat{\Psi}_m \hat{\Psi}_{m'} | m \rangle | m' \rangle = \\
& = \frac{g_s}{2} \int d^3r \left(\hat{\Psi}_{-1}^\dagger \hat{\Psi}_{-1}^\dagger \hat{\Psi}_{-1} \hat{\Psi}_{-1} + \hat{\Psi}_{-1}^\dagger \hat{\Psi}_0^\dagger \hat{\Psi}_{-1} \hat{\Psi}_0 + \hat{\Psi}_0^\dagger \hat{\Psi}_{-1}^\dagger \hat{\Psi}_0 \hat{\Psi}_{-1} \right) \quad (5.9)
\end{aligned}$$

alakot ölti, ahol számolás során a $\hat{\Psi}_0^\dagger \hat{\Psi}_0^\dagger \hat{\Psi}_0 \hat{\Psi}_0$ tagot is elhanyagoltuk, ugyanis feltesszük, hogy

a gerjesztett atomok száma kicsi, tehát ez a tag másodrendűen kicsi a többi taghoz képest.

Gross-Pitaevskii-egyenlet

Ebben az alfejezetben az $m = -1$ kvantumszámmal jellemzett alnívót vizsgáljuk meg részletesen, mely igazából maga a kondenzátum: ebből gerjeszti a rezgő nanovezeték keltette mágneses tér az $m = 0$ alnívóra az atomokat, melyek nincsenek csapdázva. A modellünkben feltesszük, hogy a kondenzált atomok száma elég nagy ahhoz, hogy a vizsgált időtartam alatt a kondenzátum kiürülését elhanyagolhassuk. Ez analógiát mutat az optikai parametrikus erősítéssel, melyet a 4.1 fejezetben ismertettünk részletesen. Az említett korábbi fejezetben a nemlineáris kristályban lejátszódó háromhullámú keverésben a pumpáláshoz használt térről tettük fel, hogy elég erős ahhoz, hogy a kiürülését elhanyagoljuk, és az eltüntető operátort egy függvénnyel helyettesítettük. Hasonló helyettesítést szokás alkalmazni a kondenzált atomok téroperátorára is, melyet

$$\hat{\Psi}_{-1}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t) \quad (5.10)$$

módon lehet helyettesíteni, ahol $\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t)$ a kondenzátum hullámfüggvénye [223]. A későbbiekben a kondenzátum hullámfüggvényének normáját úgy választjuk meg, hogy az a kondenzátumban található atomok N számával legyen egyenlő. A hullámfüggvény alakja természetesen függ a csapdázás paramétereitől, ezért ki kell elégítenie az alábbi időfüggő Gross-Pitaevskii-egyenletet,

$$i\hbar \frac{\partial \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{-1}(\mathbf{r}) + g_s |\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t), \quad (5.11)$$

amiből $\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mu' t} \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r})$ használatával az időfüggést leválasztva a

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{-1}(\mathbf{r}) + g_s |\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r})|^2 \right] \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) = \mu' \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) \quad (5.12)$$

időfüggetlen Gross-Pitaevskii-egyenletet kapjuk [224]. Egy sok atomot tartalmazó, kellően sűrű kondenzátumot vizsgálunk, melyben az atom-atom kölcsönhatás taszító jellegű. Ekkor a gáz sűrűségeloszlása elég egyenletes ahhoz, hogy a Gross-Pitaevskii-egyenletben a kinetikus energia operátort elhanyagolhassuk a többi taghoz képest, ez a Thomas-Fermi közelítés [224, 225]. Ekkor az egyenletet megoldva a kondenzátum hullámfüggvénye

$$\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\mu' - V_{-1}(\mathbf{r}, t)}{g_s}} = \sqrt{\frac{\mu - V_T(\mathbf{r})}{g_s}}, \quad (5.13)$$

ahol $\mu' = \mu + \frac{1}{2}\mu_B B_{\text{offs}} = \mu + \hbar\omega_L$, itt bevezettük az ω_L Larmor-frekvenciát [8], a μ kémiai potenciál [218] pedig

$$\mu = \left(Ng_s \frac{15}{8\pi} \omega_r^2 \omega_z \right)^{\frac{2}{5}} \left(\frac{M}{2} \right)^{\frac{3}{5}}. \quad (5.14)$$

A hullámfüggvény egy valós függvény, így pontosabb definícióval élve

$$\phi_{\text{bec}}^2(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{\mu - V_T(\mathbf{r})}{g_s}, & \text{ha } \mu - V_T(\mathbf{r}) > 0, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases} \quad (5.15)$$

A $\mu = V_T(\mathbf{r})$ feltétel a térben egy ellipszoidot jelöl ki a és c féltengelyekkel (ennek belsejében van a kondenzátum), ahol

$$a = \sqrt{\frac{2\mu}{M\omega_r^2}} \quad \text{és} \quad c = \sqrt{\frac{2\mu}{M\omega_z^2}}. \quad (5.16)$$

A későbbiekben $\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t)$ és $\hat{a}(t)$, a nanovezeték eltüntető operátorának időfejlődését fogjuk vizsgálni. Mivel ezek felcserélhetőek a Hamilton-operátor

$$\int \hat{\Psi}_{-1}^\dagger \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{-1}(\mathbf{r}) + \frac{g_s}{2} \hat{\Psi}_{-1}^\dagger \hat{\Psi}_{-1} \right) \hat{\Psi}_{-1} d^3r \quad (5.17)$$

tagjával, ezért az (5.17) tagot figyelmen kívül hagyhatjuk, így a kondenzátum gerjesztéseinek Hamilton-operátorát praktikusan

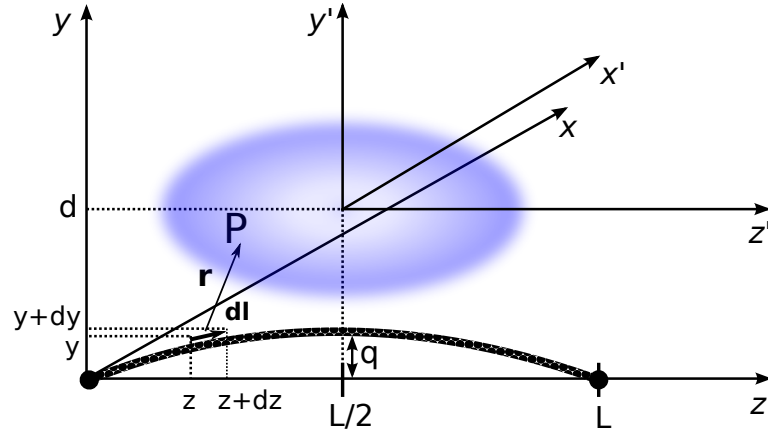
$$\hat{H}_{\text{at}} = \int g_s \phi_{\text{bec}}^2(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) d^3r \quad (5.18)$$

alakúnak vehetjük (az (5.9) egyenlet utolsó két tagja marad az (5.10) helyettesítéssel).

5.1.2. A nanovezeték modellezése

A nanovezeték keltette mágneses tér kiszámításakor használt jelöléseket az 5.3 ábra mutatja. Modellünkben a nanovezeték z irányú, L hosszúságú és d távolságra van a kondenzátumtól, ω_{nw} körfrekvenciával és q amplitúdóval mechanikai rezgést végez, miközben $I(t)$ áramot szállít, ez kelti a mágneses teret. A mágneses tér leírását elsőként a nanovezeték koordináta-rendszerében végezzük el, ezután térünk át a kondenzátum koordináta-rendszerére. Az áttérést az

$$x = x', \quad y = y' + d, \quad z = z' + \frac{L}{2}. \quad (5.19)$$



5.3. ábra. A rezgő nanovezeték egyszerűsített modellje és a mágneses tér kiszámításához használt koordináta-rendszer.

transzformáció adja meg. A mágneses teret a $P(x_0, y_0, z_0)$ pontban számoljuk ki, a nanodrót rendszerében (ld. 5.3 ábra). Az indukált tér meghatározásához a Biot-Savart törvényt használjuk [226], mely szerint egy $d\mathbf{l}$ áramvezető ívelem által keltett infinitezimális mágneses tér az \mathbf{r} helyen

$$d\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{d\mathbf{l} \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (5.20)$$

Feltesszük, hogy a nanocső az $y - z$ síkban rezeg, és a kitérése

$$y(z, t) = q \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) \cos(\omega_{nw} t) \quad (5.21)$$

módon változik. Továbbá feltesszük azt is, hogy $n = 1$, azaz az alapmódusban rezeg [227].

Elsőként a Biot-Savart törvényben használt vektoriális szorzatot számoljuk ki,

$$d\mathbf{l} = dy \hat{\mathbf{y}} + dz \hat{\mathbf{z}}, \quad \text{és} \quad \mathbf{r} = x_0 \hat{\mathbf{x}} + (y_0 - y) \hat{\mathbf{y}} + (z_0 - z) \hat{\mathbf{z}}, \quad (5.22)$$

ahol $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ az adott irányú egységvektort jelöli, így a vektoriális szorzat értéke

$$d\mathbf{l} \times \mathbf{r} = [dy(z_0 - z) - dz(y_0 - y)] \hat{\mathbf{x}} + dz x_0 \hat{\mathbf{y}} - dy x_0 \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.23)$$

A nanovezeték ívelemének y koordinátája is változik ha z irányban dz távolságot elmozdulunk,

$$dy = q \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L} z\right) \cos(\omega_{nw} t) dz. \quad (5.24)$$

Ezen eredmények felhasználásával a mágneses tér dB infinitezimális megváltozásának komponensei

$$dB_x(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{y_0}{r^3} dz + \frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{1}{r^3} q \cos(\omega_{\text{nw}} t) \left[\frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L} z\right) (z_0 - z) + \sin\left(\frac{n\pi}{L} z\right) \right] dz, \quad (5.25)$$

$$dB_y(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{x_0}{r^3} dz, \quad (5.26)$$

$$dB_z(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{x_0}{r^3} dy = -\frac{\mu_0}{4\pi} I(t) \frac{x_0}{r^3} q \cos(\omega_{\text{nw}} t) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L} z\right) dz. \quad (5.27)$$

A fenti mennyiségeket integrálva a nanodrót teljes hosszára, valamint áttérve a kondenzátum középpontjához rögzített koordináta-rendszerre a mágneses tér komponensei

$$B_x(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} I \int_0^L \frac{y + d}{\left[x^2 + \left(y + d - q \sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) \cos(\omega_{\text{nw}} t) \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + z - \xi \right)^2 \right]^{3/2}} d\xi + \frac{\mu_0}{4\pi} I q \cos(\omega_{\text{nw}} t) \int_0^L \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) + \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) \left(\frac{L}{2} + z - \xi \right)}{\left[x^2 + \left(y + d - q \sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) \cos(\omega_{\text{nw}} t) \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + z - \xi \right)^2 \right]^{3/2}} d\xi, \quad (5.28)$$

$$B_y(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} I \int_0^L \frac{x}{\left[x^2 + \left(y + d - q \sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) \cos(\omega_{\text{nw}} t) \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + z - \xi \right)^2 \right]^{3/2}} d\xi, \quad (5.29)$$

$$B_z(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} I q \cos(\omega_{\text{nw}} t) \int_0^L \frac{x \frac{n\pi}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right)}{\left[x^2 + \left(y + d - q \sin\left(\frac{n\pi}{L} \xi\right) \cos(\omega_{\text{nw}} t) \right)^2 + \left(\frac{L}{2} + z - \xi \right)^2 \right]^{3/2}} d\xi. \quad (5.30)$$

A fenti formulákban az áram időfüggését nem írtuk ki, mivel a későbbiekben konstans áramerősséget fogunk használni, ennek ellenére a formulák időfüggő áramra is érvényesek. Az eddigi modellünk a nanovezeték keltette mágneses tér leírására tetszőleges q amplitúdó esetén igaz. A nanovezetéket kvantált oszcillátorként fogjuk modellezni. Használjuk ki, hogy a rezgés amplitúdója jóval kisebb a nanocső és a kondenzátum távolságánál (az 5.3 ábra jelöléseivel $q \ll d$). Ez valós paraméterekkel azt jelenti, hogy a két rendszer távolsága mikrométer nagyságrendű, a q amplitúdó pedig nanométeres, így jogos a közelítés [182].

A mágneses tér komponenseit sorba fejthetjük q szerint, és csak az elsőrendű tagot hagyjuk meg. Ha az (5.25) – (5.27) képletekben áttérünk a kondenzátum koordinátáira, majd q szerint

sorba fejtünk, akkor a mágneses tér komponenseit

$$dB_i(\mathbf{r}, t) \approx dB_{i,q=0}(\mathbf{r}, t) + q \cdot \left. \frac{\partial}{\partial q} \right|_{q=0} dB_i(\mathbf{r}, t) \quad (5.31)$$

alakba írhatjuk, ahol $i \in \{x, y, z\}$. Ezek után integrálva dz szerint a nanovezeték hosszára megkapjuk a mágneses tér komponenseit első rendig

$$B_i(\mathbf{r}, t) = B_{i,0}(\mathbf{r}, t) + q \cos(\omega_{\text{nw}} t) \delta B_i(\mathbf{r}, t), \quad i \in \{x, y, z\} \quad (5.32)$$

alakban, ahol a $B_{i,0}(\mathbf{r}, t)$ tagok olyan komponenseket írnak le, melyek nem rezgő nanovezeték esetén is jelen lennének. Ezek közül $B_{z,0}(\mathbf{r}, t)$ nulla, mivel a nanodrót z irányú. A nanovezeték rezgéséből származó komponensek pedig

$$\begin{aligned} \delta B_x(\mathbf{r}) &= \frac{\mu_0}{4\pi} I \int_0^L \frac{x^2 - 2(y+d)^2 + (\frac{L}{2} + z - \xi)^2}{(x^2 + (y+d)^2 + (\frac{L}{2} + z - \xi)^2)^{5/2}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}\xi\right) d\xi \\ &+ \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{n\pi}{L} \int_0^L \frac{\frac{L}{2} + z - \xi}{(x^2 + (y+d)^2 + (\frac{L}{2} + z - \xi)^2)^{3/2}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}\xi\right) d\xi, \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\delta B_y(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} I \int_0^L \frac{3x(y+d)}{(x^2 + (y+d)^2 + (\frac{L}{2} + z - \xi)^2)^{5/2}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}\xi\right) d\xi, \quad (5.34)$$

$$\delta B_z(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{n\pi}{L} \int_0^L \frac{x}{(x^2 + (y+d)^2 + (\frac{L}{2} + z - \xi)^2)^{3/2}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}\xi\right) d\xi. \quad (5.35)$$

Vegyük észre, hogy a fenti formulákban az időfüggés csak az áramerősségen keresztül jelenhet meg. Mi modellünkben konstans áramot tételeztünk fel, ezért el is hagytuk a mágneses tér amplitúdóinak időfüggését.

A rezgési amplitúdó általános koordinátájaként [8] vezessük be a

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\text{eff}}\omega_{\text{nw}}}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (5.36)$$

operátort, ahol m_{eff} a nanovezeték effektív tömege [228], az általános koordináta pedig már az \hat{a}^\dagger és \hat{a} keltő- és eltüntető operátorok függvénye. Ezzel a nanovezetéket egy kvantált harmonikus oszcillátorként modellezzük, melynek Hamilton-operátora

$$\hat{H}_{\text{nw}} = \hbar\omega_{\text{nw}} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \approx \hbar\omega_{\text{nw}} \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (5.37)$$

alakú [8]. Eljutottunk tehát oda, hogy mind a két rendszer, a nanovezeték és a Bose-Einstein

kondenzátum Hamilton-operátorát meghatároztuk. Következzen tehát a disszertáció egyik fő eredménye, a két rendszer közötti csatolás felírása.

5.1.3. Csatolás a nanovezeték és a Bose-Einstein kondenzátum között

Mint arra a korábbi fejezetekben már utaltunk, a nanovezeték és a Bose-Einstein kondenzátum közötti kölcsönhatás egy magnetomechanikai csatoláson keresztül jön létre. A rezgő nanovezetéken áramot vezetünk keresztül, ez generál egy időben változó mágneses teret, mely a kondenzátumban spinátmeneteket idéz elő. Az átbillentett spinek ($m = 0$) energiája alacsonyabb, mint a kiinduló állapot ($m = -1$) energiája (ld. 5.1 ábra). Ez az energia a csatoláson keresztül a nanovezeték kinetikus energiáját növeli. A nagyobb amplitúdóval történő rezgés erősebb mágneses teret kelt, így emiatt a pozitív visszacsatolás miatt a kölcsönhatás a nanovezeték rezgési amplitúdójának parametrikus erősítésére vezet.

A két rendszer közti csatolást a

$$V_{\text{int}} = g_F \mu_B \hat{\mathbf{F}} \mathbf{B}_{\text{nw}}(\mathbf{r}, t) \quad (5.38)$$

egyrészesekés Hamilton-operátor írja le, mely másodkvantált formalizmusban a

$$\hat{V}_{\text{int}} = \sum_{m, m'=-1}^1 \langle m | \int \hat{\Psi}_m^\dagger(\mathbf{r}, t) g_F \mu_B \hat{\mathbf{F}} \mathbf{B}_{\text{nw}}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}, t) d^3r | m' \rangle \quad (5.39)$$

alakot ölti. A nanovezeték keltette z irányú teret nem vesszük figyelembe a számításaink során, annak iránya megegyezik a B_{off} offset tér irányával és sokkal gyengébb annál. Az atomi spin

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad F_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

komponenseit behelyettesítve és a $\hat{\Psi}_1(\mathbf{r}, t)$ tagot elhanyagolva a csatolás a

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{int}} = -\frac{\mu_B}{2\sqrt{2}} \int \left[\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) e^{i(\omega_L + \frac{\mu}{\hbar})t} (B_x(\mathbf{r}, t) + iB_y(\mathbf{r}, t)) \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) + \right. \\ \left. + \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) e^{-i(\omega_L + \frac{\mu}{\hbar})t} (B_x(\mathbf{r}, t) - iB_y(\mathbf{r}, t)) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \right] d^3r \quad (5.41) \end{aligned}$$

alakba írható, a képletben pedig alkalmaztuk a $\hat{\Psi}_{-1}(\mathbf{r}, t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar}\mu t} \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r})$ közelítést, mint ahogy azt az 5.1.1. fejezetben bemutattuk.

Eddigi számolásunk tetszőleges mágneses térre igaz volt, most az (5.32) és (5.36) egyenletek

alapján térjünk át a kvantált rezgést végző nanodrót által keltett mágneses térre. Ekkor a csatolás alakja

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{int}} = & -\frac{\mu_B}{2\sqrt{2}} \int \left[\phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) e^{i(\omega_L + \frac{\mu}{\hbar})t} \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\text{eff}}\omega_{\text{nw}}}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) (\delta B_x(\mathbf{r}) + i\delta B_y(\mathbf{r})) \right. \\ & \left. + \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) e^{-i(\omega_L + \frac{\mu}{\hbar})t} \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m_{\text{eff}}\omega_{\text{nw}}}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) (\delta B_x(\mathbf{r}) - i\delta B_y(\mathbf{r})) \right] d^3r. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Vizsgáljuk meg a különböző frekvenciák nagyságrendjét! A kísérletekben általánosan használt paramétereket behelyettesítve a Bose-Einstein kondenzátum (5.14) egyenlettel definiált kémiai potenciáljából számított μ/\hbar mennyiség értéke a kHz tartományban mozog [191, 216]. Ennél sokkal nagyobb a nanovezeték frekvenciája, mely 100 kHz fölött lehet, de szén nanocsövek-re MHz, sőt akár GHz nagyságrendű is lehet [182, 229]. Ezt a frekvenciakülönbséget az ω_L Larmor-frekvencián keresztül a B_{off} külső tér beállításával tudjuk áthidalni, ennek megfelelő választásával ω_L a 0.1 – 100 MHz tartományban is mozoghat.

Térjünk át forgóhullámú képbe mind a nanovezeték, mind pedig a kondenzátum leírásában! A nanovezetéket egy ω_L körfrekvenciával jellemzett, a kondenzátumból gerjesztett atomokat pedig egy μ/\hbar körfrekvenciájú képben írjuk le. Ekkor a gyorsan oszcilláló tagokat elhanyagolva megkapjuk a keresett csatolási Hamilton-operátort

$$\hat{V}_{\text{int}} = \int \hbar\eta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) \hat{a} + \hbar\eta^*(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{a}^\dagger d^3r. \quad (5.43)$$

A forgóhullámú kép miatt módosul a kondenzátum gerjesztéseinek és a nanovezeték Hamilton-operátora is,

$$\hat{H}_0 = \hbar\Delta \hat{a} \hat{a}^\dagger - \int V_T(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, t) d^3r, \quad (5.44)$$

ahol $\Delta = \omega_{\text{nw}} - \omega_L$ az elhangolás, $\eta(\mathbf{r})$ pedig a csatolási állandó a két rendszer között, melynek alakja

$$\eta(\mathbf{r}) = \frac{g_F \mu_B}{2\sqrt{\hbar m_{\text{eff}} \omega_{\text{nw}}}} \left(\delta B_x(\mathbf{r}) + i\delta B_y(\mathbf{r}) \right) \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}) = \beta(\mathbf{r}) \phi_{\text{bec}}(\mathbf{r}). \quad (5.45)$$

A

$$\beta(\mathbf{r}) = \frac{g_F \mu_B}{2\sqrt{\hbar m_{\text{eff}} \omega_{\text{nw}}}} \left(\delta B_x(\mathbf{r}) + i\delta B_y(\mathbf{r}) \right) \quad (5.46)$$

mennyiség tartalmazza a mágneses tér járulékát, bevezetését pedig az indokolta, hogy mint azt a későbbiekben látni fogjuk, bizonyos esetekben ez a tényező közelíthető konstansként a kondenzátum térfogatán belül.

5.2. A mozgásegyenletek megoldása

5.2.1. A kondenzátum diszkretizálása

A folytonos térváltozóról térjünk át diszkrét, $\Delta v = dx^3$ térfogategységekre (cellákra). Ez a téroperátor esetében egy $\hat{\psi}_0(\mathbf{r}, t) \rightarrow \sqrt{\Delta v} \hat{b}(t)$ transzformációt jelent, az integrálok helyett pedig a cellákra vett összegzésre vezet. A teljes, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}$ Hamilton-operátor tagjait átírva erre a diszkrét formára

$$\hat{H}_0 = \hbar \Delta \hat{a} \hat{a}^\dagger - \sum_x \hbar V_T(x) \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x = \hbar \Delta \hat{a} \hat{a}^\dagger - \sum_x \hbar \omega_x \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x, \quad (5.47)$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = \sum_x \hbar \eta_x \hat{b}_x \hat{a} + \hbar \eta_x^* \hat{b}_x^\dagger \hat{a}^\dagger, \quad (5.48)$$

ahol az $\eta(\mathbf{r})$ csatolási állandót is átírtuk a diszkrét cellákra, valamint bevezettük az ω_x mennyiséget, melyet egy adott cella körfrekvenciájaként képzelhetünk el. Számszerűen a két mennyiség

$$\eta_x = \beta(x) \phi_{\text{bec}}(x) \sqrt{\Delta v} \quad \text{és} \quad \omega_x = \frac{V_T(x)}{\hbar}. \quad (5.49)$$

A teljes Hamilton-operátor alakja ebben a közelítésben

$$\hat{H} = \hbar \Delta \hat{a} \hat{a}^\dagger - \sum_x \hbar \omega_x \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x + \hbar \sum_x (\eta_x \hat{b}_x \hat{a} + \eta_x^* \hat{b}_x^\dagger \hat{a}^\dagger), \quad (5.50)$$

láthatóan hasonló alakot ölt mint a (4.5) egyenlet, melyben két módus szerepelt csak. A különbség jelen esetben annyi, hogy a csatolás itt nem két oszcillátor között jön létre, hanem egy oszcillátor és egy inhomogén kiszélesedett közeg között. Írjuk fel a

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a} = [\hat{a}, \hat{H}], \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_x^\dagger = [\hat{b}_x^\dagger, \hat{H}] \quad (5.51)$$

Heisenberg-egyenleteket, ekkor az operátorok mozgásegyenletére azt kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} \hat{a} = -i\Delta \hat{a} - i \sum_x \eta_x \hat{b}_x^\dagger \quad \frac{d}{dt} \hat{b}_x^\dagger = -i\omega_x \hat{b}_x^\dagger + i\eta_x \hat{a}. \quad (5.52)$$

A fenti egyenleteket együttesen is felírhatjuk. Ha m cellára osztottuk a kondenzátumot, akkor a

$$\frac{d}{dt}\mathbf{v} = \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}_1^\dagger \\ \hat{b}_2^\dagger \\ \vdots \\ \hat{b}_m^\dagger \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \Delta & \eta_1 & \eta_2 & \cdots & \eta_m \\ -\eta_1 & \omega_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\eta_2 & 0 & \omega_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\eta_m & 0 & \cdots & 0 & \omega_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b}_1^\dagger \\ \hat{b}_2^\dagger \\ \vdots \\ \hat{b}_m^\dagger \end{pmatrix} = -i\mathbf{M}\mathbf{v} \quad (5.53)$$

egyenletet kapjuk, melynek formális megoldása

$$\mathbf{v}(t) = e^{-i\mathbf{M}t}\mathbf{v}(0), \quad (5.54)$$

ebből pedig a nanovezeték eltüntető operátorának időfejlődése

$$\hat{a}(t) = (e^{-i\mathbf{M}t})_{1,1} \hat{a}(0) + \sum_{x=1}^m (e^{-i\mathbf{M}t})_{1,x+1} \hat{b}_x^\dagger. \quad (5.55)$$

Ha feltesszük, hogy a rendszer alapállapota kezdetben közelíthető $|\psi(0)\rangle = |0\rangle_{\text{nw}} |0\rangle_{\text{bec}}$ módon [230], akkor a nanovezeték gerjesztéseinek időbeli várható értéke

$$\langle \hat{n}(t) \rangle = \langle \hat{a}^\dagger(t) \hat{a}(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{a}^\dagger(t) \hat{a}(t) | \psi(0) \rangle = \sum_{x=1}^m \left| (e^{-i\mathbf{M}t})_{1,x+1} \right|^2. \quad (5.56)$$

A rendszer fizikai paramétereinek ismeretében felírhatjuk az \mathbf{M} mátrixot, majd numerikusan kiszámolhatjuk a kapott exponenciális függvényt, ezáltal megkapjuk a gerjesztések számát az idő függvényében. Az eredmények alacsony felbontás, azaz kis m cellaszám esetén még függeni fognak a diszkretizálás felbontásától, elég kis térfogatelemeket véve azonban ez a függés el kell hogy tűnjön. A részletes felbontás azt jelenti, hogy az $(m+1) \times (m+1)$ -es \mathbf{M} mátrix mérete nagy. Például ha az ellipszoid alakú kondenzátumot egy olyan téglatestbe foglaljuk bele, melynek oldalait mondjuk 25,25 illetve 50 egységre osztottuk, akkor a vizsgált rács több mint 30 000 cellából áll, így az \mathbf{M} mátrix mérete is nagyon nagy. A dolgozat előző részében láttuk, hogy nagy mátrixok numerikus kezelése nem egyszerű feladat, ezért a következőkben egy olyan módszert mutatok be, mellyel bizonyos közelítésben analitikusan is kezelhető, valamint numerikusan is sokkal kisebb erőforrást igényel.

A diszkrét kondenzátumra felírt egyenletek erős hasonlóságot mutatnak a 4.1 fejezetben kapott eredményekkel, itt is $e^{-i\mathbf{M}t}$ alakú mátrixfüggvénnyel kell dolgoznunk. Ez egyben a probléma Green-függvénye is, ezért az analógiát kihasználva vizsgáljuk meg, hogyan néznek ki a fenti egyenletek folytonos koordinátákban. Ha a Heisenberg-egyenleteket az $\hat{a}(t)$ és a $\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t)$ ope-

rátorokra írjuk fel, akkor az (5.55) egyenlettel analóg módon a megoldások a Green-függvény segítségével

$$\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) = G_{ra}(t) \hat{a}(0) + \int G_{r,r'}(t) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}', 0) d^3r', \quad (5.57)$$

$$\hat{a}(t) = G_{aa}(t) \hat{a}(0) + \int G_{a,r'}(t) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}', 0) d^3r' \quad (5.58)$$

alakban írhatóak. Ezen tudás birtokában az $\langle \hat{n}(t) \rangle = \langle \hat{a}^\dagger(t) \hat{a}(t) \rangle$ várható értéket is kiszámíthatjuk,

$$\langle \hat{n}(t) \rangle = |G_{aa}(t)|^2 \langle \hat{a}^\dagger(0) \hat{a}(0) \rangle + \int d^3r \int d^3r' G_{ar}^*(t) G_{ar'}(t) \langle \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}, 0) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}', 0) \rangle = \int |G_{ar}(t)|^2 d^3r, \quad (5.59)$$

mely eredmény megfelel az (5.56) összefüggésnek. Vegyük észre, hogy a $G_{ar}(t)$ és a $G_{aa}(t)$ függvények nem függetlenek egymástól. Az $[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 1$ kommutációs relációnak minden időpillanatban fenn kell állnia, ebből pedig következik, hogy

$$\begin{aligned} [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] &= |G_{aa}(t)|^2 [\hat{a}(0), \hat{a}^\dagger(0)] + \int d^3r \int d^3r' G_{ar}^*(t) G_{ar'}(t) [\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, 0), \hat{\Psi}_0(\mathbf{r}', 0)] = \\ &= |G_{aa}(t)|^2 - \int |G_{ar}(t)|^2 d^3r = 1. \end{aligned} \quad (5.60)$$

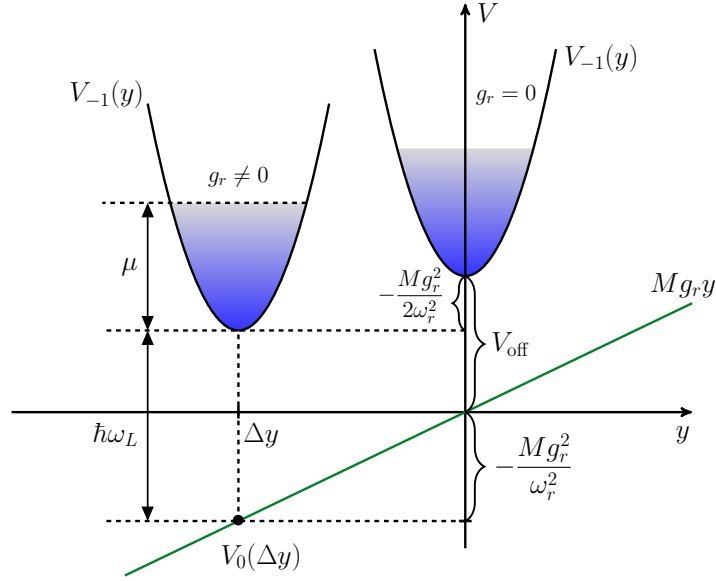
Ez azt jelenti, hogy ha az (5.59) kifejezésben a Green-függvényre vett integrál időben növekszik, akkor a $|G_{aa}(t)|^2$ kifejezés értéke is vele együtt fog növekedni az erősítés során.

5.2.2. Gravitáció és veszteségek figyelembevétele

A gravitáció hatása

A felállított modellben nézzük meg, hogy a Föld gravitációs terének figyelembevétele milyen változást okoz az eddigiekhez képest, és milyen paraméterek mellett lehet elhanyagolni. Mint a bevezetőben említettük, a kondenzátum egy mágneses csapdában van, melyet egy harmonikus csapdapotenciállal írunk le. A csapdapotenciált annak minimuma körül fejtjük sorba, innen ered a harmonikus csapda elnevezés. Az eddig vizsgált ideális esethez képest a gravitációs potenciál figyelembevételével eltolódik a csapda minimuma [231]. Az $m = -1$ atomokra ható potenciált

$$V_{-1}(\mathbf{r}) = V_T(\mathbf{r}) + V_g(\mathbf{r}) + V_{\text{off}} \quad (5.61)$$



5.4. ábra. Gravitáció hatása

módon írhatjuk fel, ahol $V_T(\mathbf{r})$ a már megismert (5.2) csapdapotenciál, $V_{\text{off}} = m g_F \mu_B B_{\text{off}}$ a külső térből származó potenciál, $V_g(\mathbf{r}) = M g_r y$ pedig a gravitációs potenciál, ahol g_r a gravitációs gyorsulást jelöli. A csapda- és gravitációs potenciálokat összevonhatjuk teljes négyzetté alakítással,

$$\begin{aligned} V_T(\mathbf{r}) + V_g(\mathbf{r}) &= \frac{M}{2} \left(\omega_r^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2 \right) + M g_r y = \\ &= \frac{M}{2} \left[\omega_r^2 x^2 + \omega_r^2 \left(y + \frac{g_r}{\omega_r^2} \right)^2 + \omega_z^2 z^2 \right] - \frac{M g_r^2}{2 \omega_r^2}. \end{aligned} \quad (5.62)$$

A $\Delta y = -g_r / \omega_r^2$ tagot az irodalomban gravitációs eltolódásnak (*gravitational sag*) is nevezik [231]. Az 5.4 ábrán a $V_{-1}(\mathbf{r})$ potenciált ábrázoltuk az y függvényében ($x = 0, z = 0$ esetén), valamint a gravitációból eredő potenciált. Az $m = 0$ atomokra nem hat a sem a csapdapotenciál, sem pedig a külső tér, a gravitációs potenciál viszont igen. A Δy helyen az egyes potenciálok értéke

$$V_0(\Delta y) = M g_r \Delta y = -\frac{M g_r^2}{\omega_r^2} \quad \text{és} \quad V_{-1}(\Delta y) = -\frac{M g_r^2}{2 \omega_r^2}. \quad (5.63)$$

Toljuk el a koordináta-rendszerünket, legyen $y' = y + \Delta y$. Az új koordinátában

$$V_0(y') = M g_r y - \frac{M g_r^2}{\omega_r^2}, \quad V_{-1}(y') = V_{-1}(y) - \frac{M g_r^2}{2 \omega_r^2}. \quad (5.64)$$

Toljuk el a potenciál minimumát is Mg_r^2/ω_r^2 értékkel. Ezzel az új koordináta-rendszerben az egyes potenciálok

$$V_0(y') = Mg_r y, \quad V_{-1}(y') = V_{-1}(y) + \frac{Mg_r^2}{2\omega_r^2}. \quad (5.65)$$

Az $m = 0$ atomok nincsenek csapdázva, így elhagyják a kondenzátumot. Eközben szóródnak a kondenzátum atomjain, az ebből származó effektív szórási potenciál értéke $g_s\phi_{\text{bec}}^2(\mathbf{r}) = \mu - V_T(\mathbf{r})$. Ezt a járulékot is figyelembe véve a potenciál alakja

$$V_0(y') = \mu - V_T(\mathbf{r}) + Mg_r y. \quad (5.66)$$

Azt, hogy a gravitáció hatása mennyire jelentős a

$$v \equiv \frac{\Delta y}{a} = \frac{g_r}{\omega_r} \sqrt{\frac{M}{2\mu}} \quad (5.67)$$

mennyiséggel jellemezhetjük, ami azt adja meg, hogy a kondenzátum középpontjának eltolódása hogyan arányul a kondenzátum féltengelyének méretéhez. Ha $v > 1$, akkor a gravitáció hatása jelentős, ha pedig v ennél jóval kisebb, akkor a gravitációs mező jelenlétét elhanyagolhatjuk. Ez az eset például egy erős csapdában érhető el, azaz akkor, amikor az ω_r csapdafrekvencia elég nagy.

Veszteségek figyelembevétele

A 4.1 fejezethez hasonlóan, vegyük figyelembe a kondenzátum gerjesztéseinek és a nano-vezeték veszteségeit. Az optikai parametrikus erősítéshez hasonlóan, a parametrikus erősítés csak akkor fog fellépni, ha kompenzáljuk a veszteségeket. Mint látni fogjuk, a vizsgált hibrid kvantumrendszerben ennek matematikai leírása sokkal bonyolultabb, mivel itt az egyik oszcillátor helyett egy inhomogén kiszélesedésű közeg, a kondenzátum szerepel. Az (5.43)-(5.44) Hamilton-operátor felírásakor egy μ/\hbar forgóhullámú képet használtunk, így az előző fejezet alapján a gravitáció figyelembevételével a rendszert leíró Hamilton-operátor tagjai a

$$\hat{H}_0 = \hbar\Delta\hat{a}^\dagger\hat{a} - \int (V_T(\mathbf{r}) - Mg_r y) \hat{\psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_0(\mathbf{r}, t) d^3r, \quad (5.68)$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = \int \left(\hbar\eta(\mathbf{r}) \hat{\psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{a}^\dagger + \hbar\eta^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_0(\mathbf{r}, t) \hat{a} \right) d^3r, \quad (5.69)$$

alakba írhatóak. A Heisenberg-Langevin egyenleteket felírva

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}(t)] - \kappa\hat{a}(t) + \hat{f}_a(t), \quad (5.70)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t)] - \frac{1}{2}\gamma(\mathbf{r})\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) + \hat{f}(\mathbf{r}, t), \quad (5.71)$$

ahol κ a nanovezeték csillapítási tényezője, $\gamma(\mathbf{r})$ a kondenzátum gerjesztéseinek veszteségét írja le, a Langevin zajoperátorokra pedig teljesül [210], hogy

$$\langle \hat{f}_a(t)\hat{f}_a^\dagger(t') \rangle = 2\kappa(\bar{n}_a + 1)\delta(t - t'), \quad (5.72)$$

$$\langle \hat{f}(\mathbf{r}, t)\hat{f}^\dagger(\mathbf{r}', t') \rangle = \gamma(\mathbf{r})(\bar{n}_r + 1)\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'). \quad (5.73)$$

Modellünkben azt az egyszerűsített esetet vizsgáltuk, melyben a kondenzátum gerjesztéseinek veszteségét leíró $\gamma(\mathbf{r})$ tényező helytől független, $\gamma(\mathbf{r}) \equiv \gamma$. Az így kapott mozgásegyenletek

$$i\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = \Delta\hat{a}(t) + \int \eta(\mathbf{r})\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t)d^3r - i\kappa\hat{a}(t) + i\hat{f}_a(t), \quad (5.74)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{V_T(\mathbf{r}) - Mgr_y}{\hbar} \right) \hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) - \eta(\mathbf{r})\hat{a} - \frac{i}{2}\gamma\hat{\Psi}_0^\dagger(\mathbf{r}, t) + i\hat{f}^\dagger(\mathbf{r}, t). \quad (5.75)$$

5.2.3. A csatolási állandó küszöbértékének meghatározása

Ebben a fejezetben a rezolvens módszer [232, 233] alkalmazásával határozzuk meg a kritikus csatolási állandó értékét. Hasonló formalizmust alkalmaztak korábban rezonátorban lévő spineknek a rezonátor módusaihoz való csatásának a leírására [234]. Hasonlóan a 4.1 fejezetben alkalmazott gondolatmenethez, a mozgásegyenletek homogén részét kielégítő Green-függvények

$$i\frac{d}{dt}G_{aa}(t) = (\Delta - i\kappa)G_{aa}(t) + \int \eta(\mathbf{r})G_{ra}(t)d^3r, \quad (5.76)$$

$$i\frac{d}{dt}G_{ra}(t) = \left(\frac{V_T(\mathbf{r}) - Mgr_y}{\hbar} - \frac{i}{2}\gamma \right) G_{ra}(t) - \eta^*(\mathbf{r})G_{aa}(t), \quad (5.77)$$

ahol a kezdeti feltételek

$$G_{aa}(0) = 1, \quad G_{rr'}(0) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad G_{ar'}(0) = G_{ra}(0) = 0. \quad (5.78)$$

Általánosan elmondható, hogy a

$$\frac{dy}{dx} + f(x)y = h(x) \quad (5.79)$$

differentiálegyenlet formális megoldása, ha az $F'(x) = f(x)$ jelölést használjuk

$$y(x) = e^{-F(x)} \int e^{F(x)} h(x) dx. \quad (5.80)$$

A fenti összefüggést alkalmazva az (5.77) egyenletre

$$G_{ra}(t) = i\eta^*(\mathbf{r}) \int_0^t \exp \left[\left(\frac{V_T(\mathbf{r}) - M g_r y}{\hbar} - \frac{i}{2} \gamma \right) (t - \tau) \right] G_{aa}(\tau) d\tau. \quad (5.81)$$

A kapott formális megoldást behelyettesítve az (5.76) egyenletbe egy zárt integro-differenciál egyenletet kapunk,

$$i \frac{d}{dt} G_{aa}(t) = (\Delta - i\kappa) G_{aa}(t) + i \int_0^t G_{aa}(\tau) K(t - \tau) d\tau, \quad (5.82)$$

ahol a $K(t)$ magfüggvénybe foglaltuk bele a térintegrált,

$$K(t) \equiv \int |\eta(\mathbf{r})|^2 \exp \left[\left(\frac{V_T(\mathbf{r}) - M g_r y}{\hbar} - \frac{i}{2} \gamma \right) t \right] d^3r. \quad (5.83)$$

Fourier-térben a konvolúció leegyszerűsödik, ehhez azonban be kell vezetni a retardált(−) illetve avanszált(+) függvényeket [234],

$$G_{aa}^{\pm}(t) = \mp i \Theta(\pm t) G_{aa}(t), \quad K_{aa}^{\mp}(t) = \pm i \Theta(\pm t) K_{aa}(t), \quad (5.84)$$

ahol $\Theta(t)$ a Heaviside-függvény [148]. Az (5.82) egyenletbe behelyettesítve

$$i \frac{d}{dt} G_{aa}^+(t) = \delta(t) + (\Delta - i\kappa) G_{aa}^+(t) - \int_{-\infty}^{\infty} G_{aa}^+(\tau) K^+(t - \tau) d\tau, \quad (5.85)$$

és kihasználtuk, hogy a $\Theta(t)$ függvény deriváltja a Dirac-delta [148]. Ezt az integro-differenciál egyenletet a

$$\tilde{G}_{aa}^+(z) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{aa}^+(t) e^{izt} dt \quad (5.86)$$

Fourier-Laplace transzformációval [235] algebrai egyenletté lehet alakítani,

$$z \tilde{G}_{aa}^+(z) = 1 + (\Delta - i\kappa) \tilde{G}_{aa}^+(z) - \tilde{K}^+(z) \tilde{G}_{aa}^+(z). \quad (5.87)$$

Formálisan ezt az egyenletet már meg tudjuk oldani,

$$\tilde{G}_{aa}^+(z) = \left[z - \Delta + i\kappa + \tilde{K}^+(z) \right]^{-1}. \quad (5.88)$$

Vezessük be a $k(t) = e^{-i\omega t - \gamma t}$ függvényt, ilyen alakú például a $K(t)$ függvény (5.83) definíciójában szereplő exponenciális függvény is. Ezen új mennyiség avanszált illetve retardált függvényei

$$k^+(t) = -i\Theta(t)e^{-i\omega t - \gamma t}, \quad k^-(t) = i\Theta(-t)e^{-i\omega t - \gamma t}. \quad (5.89)$$

Ezen függvények Fourier-Laplace transzformáltjai

$$\tilde{k}^+(z) = -i \int_0^\infty e^{i(z-\omega)t - \gamma t} dt = \frac{1}{z - \omega + i\gamma}, \quad (5.90)$$

ha $\text{Im}(z) < -\gamma$, illetve

$$\tilde{k}^-(z) = i \int_{-\infty}^0 e^{i(z-\omega)t - \gamma t} dt = \frac{1}{z - \omega + i\gamma}, \quad (5.91)$$

ha $\text{Im}(z) > -\gamma$. Belátható továbbá, hogy amikor $\text{Im}(z)$ a $-\gamma$ értékhez tart alulról vagy fölülről, akkor

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \tilde{k}^+(\omega - i\gamma \pm i\eta) = \mathbb{P} \frac{1}{\omega - \omega'} \mp i\pi\delta(\omega - \omega'), \quad (5.92)$$

ahol \mathbb{P} a főértékintegrált jelöli, $\delta(x)$ pedig a Dirac-delta [148]. Vezessük be a

$$\rho(\omega) \equiv \int |\eta(\mathbf{r})|^2 \delta\left(\omega - \frac{V_T(\mathbf{r}) - Mgry}{\hbar}\right) d^3r \quad (5.93)$$

csatolási sűrűségfüggvényt, valamint ennek integrálját, az

$$\Omega^2 = \int \rho(\omega) d\omega = \int |\eta(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (5.94)$$

kollektív csatolási állandót. Mint említettük, a $K(t)$ magfüggvény definíciójában is az integrálban $k(t)$ alakú exponenciális függvény szerepel, így az újonnan bevezetett csatolási sűrűségfüggvény segítségével a korábbi, (5.83) definíciót átírhatjuk

$$K(t) = \int \rho(\omega) k(t) d\omega \quad (5.95)$$

alakúra. A $\rho(\omega)$ csatolási sűrűségfüggvény egy valós függvény, így vezessük be a

$$\tilde{K}(z) = \int \frac{\rho(\omega)}{z - \omega + i\gamma} d\omega \quad (5.96)$$

függvényt, mely az értelmezési tartományaikon megegyezik a $\tilde{K}^+(z)$ illetve $\tilde{K}^-(z)$ függvényekkel, az $\omega \mapsto \omega - i\gamma$ vonal mentén pedig vágása van, itt a képzetes része $2\pi\rho(\omega)$ értéket ugrik. A $\tilde{K}(z)$ függvény az energiaszinteknek a kölcsönhatás nélküli értéktől való eltolódását is meghatározza (*level-shift function*) [233, 234]. Ha felülről vagy alulról tartunk a vágáshoz, akkor az (5.92) egyenlethez hasonlóan

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \tilde{K}(\omega - i\gamma \pm i\eta) = \mathcal{D}(\omega) \mp i\pi\rho(\omega), \quad (5.97)$$

ahol a valós rész megfelel a

$$\mathcal{D}(\omega) = \mathbb{P} \int \frac{\rho(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \quad (5.98)$$

frekvencia eltolásnak.

Az időfüggő Green-függvényt inverz Fourier-Laplace transzformációval kaphatjuk meg,

$$G_{aa}(t) = \frac{i}{2\pi} \int_C \tilde{G}_{aa}^+(z) e^{-izt} dz, \quad (5.99)$$

amennyiben $t > 0$, ahol a C kontúr a Fourier-Laplace transzformáció konvergenciatartományában található. A $\tilde{G}_{aa}^+(z)$ függvényt analitikusan kiterjeszthetjük az alsó félsíkra és bezárhatjuk az integrálási kontúrt. Mivel $\tilde{K}^+(z) \sim \Omega^2/z$ valamint $\tilde{G}_{aa}^+(z) \sim 1/z$ nagy z értékekre, így az integrálási kontúrral a végtelenbe tartva az arra vett integrál eltűnik. Természetesen $\tilde{G}_{aa}^+(z)$ megőrökl a $\tilde{K}^+(z)$ vágásából származó diszkontinuitást is, melyet az integrál kiszámítása során a reziduumokkal együtt figyelembe kell venni. Ezen gondolatmenet alapján tehát

$$G_{aa}(t) = \sum_k R_k e^{-iz_k t} - \frac{i}{2\pi} \oint \tilde{G}_{aa}^+(z) e^{-izt} dz, \quad (5.100)$$

ahol $R_k = \left[1 + d\tilde{K}^+(z_k)/dz\right]^{-1}$ a $\tilde{G}_{aa}^+(z)$ függvény reziduuma a z_k egyszeres pólusban, a körintegrál pedig a vágást öleli körül az óramutató járásával ellentétes irányítással. Az erősítésért azok a z_k pólusok felelnek, melyekre $\text{Im}(z_k) > 0$, ezek adják az időben exponenciálisan felfutó megoldást.

A pólusokat az (5.88) egyenlet alapján a

$$z - \Delta + i\kappa + \tilde{K}(z) = 0 \quad (5.101)$$

karakterisztikus egyenlet adja, ahol a magfüggvény analitikus kiterjesztését használtuk. Fizikailag arra vagyunk kíváncsiak, hogy mikor érjük el azt a kritikus csatolási erősséget, amikor a rendszerben megjelenik az erősítés. Ez annak felel meg, hogy van legalább egy olyan pólus,

aminek a képzetes része pozitív. Ahhoz, hogy ezt egy adott rendszerre meghatározzuk, először gondoljuk végig, hogy mely mennyiségekkel lehet a legjobban leírni a rendszert, valamint ezek közül melyek azok, amelyeket változtatni tudunk annak érdekében, hogy a csatolás elérje a kritikus értéket. Természetéből adódik, hogy az Ω kollektív csatolási állandó ilyen mennyiség, ugyanis az (5.94) és az (5.45) egyenleteket megnézve láthatjuk, Ω tartalmazza a nanovezeték és a kondenzátum közötti csatolás fizikai és geometriai adatait, így például a két rendszer közötti d távolság, vagy a vezetékben folyó I áram változtatásával hangolható. Szintén jó paraméter a $\Delta = \omega_{\text{nw}} - \omega_L$, a nanovezeték kezdeti, csatolás nélküli (*bare*) elhangolása, adott kísérleti elrendezésben a Larmor-frekvencián keresztül ezt is meg tudjuk változtatni a külső B_{off} tér segítségével. Ezt akár úgy is elképzelhetjük, hogy rezonanciára hangoljuk a rendszereket. Ezen megfontolások alapján a módszerünk a továbbiakban az lesz, hogy ahelyett, hogy egy adott paraméteregyüttes (kísérleti elrendezés) mellett megkeresnénk az (5.101) karakterisztikus egyenlet megoldásait, azt fogjuk megnézni, hogy hogyan válasszuk meg az Ω és Δ paramétereket úgy, hogy z pólus legyen.

Vezessünk be új, dimenziótlan mennyiségeket. Mérjük a frekvenciát Γ egységekben, mely lehet például $\Gamma = \mu/\hbar$, a gravitáció nélküli esetben mért kondenzátum spektrumának szélessége. A dimenziótlanított, és az $\int \bar{\rho}(x) dx = 1$ feltétellel egyre normált csatolási sűrűségfüggvényt

$$\bar{\rho}(x) \equiv \frac{\Gamma}{\Omega^2} \rho(\Gamma x) \quad (5.102)$$

módon definiáljuk. Hasonló megfontolások alapján vezessük be a dimenziótlan

$$\bar{K}(x + iy) = \frac{\Gamma}{\Omega^2} \tilde{K}[\Gamma(x + iy) - i\gamma] \quad (5.103)$$

függvényt, valamint legyen $z = (x + iy)\Gamma - i\gamma$, ahol x, y valós számok. Bontsuk szét az (5.101) karakterisztikus egyenletet valós illetve képzetes részek szerint. A pólus képzetes része az erősítés rátáját adja meg, míg a valós része az elhangolást. A képzetes részre az

$$\text{Im}(z) + \kappa + \frac{\Omega(z)^2}{\Gamma} \text{Im}[\bar{K}(x + iy)] = 0 \quad (5.104)$$

egyenletnek kell teljesülnie, melyből

$$\Omega^2(z) = -\Gamma \frac{\Gamma y + \kappa - \gamma}{\text{Im}[\bar{K}(x + iy)]}. \quad (5.105)$$

A nevezőben az $\text{Im}(\bar{K}(x + iy))$ kifejezésében a $\bar{\rho}(\omega)$ függvény konvolúciója jelenik meg egy

Lorentz-görbével, ebből pedig az következik, hogy $|\operatorname{Im} [\bar{K}(x + iy)]| \leq \pi \max(\bar{\rho}(x))$, ahol $\max(\bar{\rho}(x))$ a $\bar{\rho}(x)$ függvény maximumát jelöli.

Az $\Omega(z)$ függvényt tehát alulról becsülhetjük

$$\Omega(z) \geq \Omega_{\text{tr}} = \sqrt{\frac{\kappa \Gamma}{\pi \max(\bar{\rho}(x))}} \quad (5.106)$$

módon, ahol Ω_{tr} a küszöb (*threshold*) csatolási erősséget jelöli. A karakterisztikus egyenlet valós része

$$\operatorname{Re}(z) - \Delta(z) + \frac{\Omega^2(z)}{\Gamma} \operatorname{Re} [\bar{K}(x + iy)] = 0, \quad (5.107)$$

ebből pedig az elhangolás

$$\Delta(z) = \Gamma x + \frac{\Omega^2(z)}{\Gamma} \operatorname{Re} [\bar{K}(x + iy)]. \quad (5.108)$$

Az erősítéshez arra van szükségünk, hogy a pólus képzetes része, $\operatorname{Im}(z)$ pozitív legyen, azaz teljesüljön, hogy $y > \gamma/\Gamma$. Ha $\Gamma \gg \gamma$, akkor az (5.97) egyenlet felhasználásával

$$\bar{K}\left(x + i \frac{\gamma}{\Gamma}\right) \approx \bar{K}(x + i 0^+) = \bar{\mathcal{D}}(x) - i\pi\bar{\rho}(x). \quad (5.109)$$

Ekkor a kollektív csatolási erősség és a hozzá tartozó elhangolás

$$\Omega(z) = \sqrt{\frac{\kappa \Gamma}{\pi \bar{\rho}(x)}}, \quad \Delta(z) = \Gamma x + \frac{\Omega^2(z)}{\Gamma} \mathbb{P} \int \frac{\bar{\rho}(y)}{x - y} dy. \quad (5.110)$$

Mint korábban említettük, $\operatorname{Im}(z)$ a mechanikai rezgés erősítési rátáját adja meg, míg $\operatorname{Re}(z) = \Gamma x$ a nanovezeték frekvenciájának elhangolódását. A fenti formulából láthatjuk, hogy a nanovezeték és a kondenzátum közti magnetomechanikai csatolás miatt a vezeték rezgési frekvenciája elhangolódik, melynek mértékét a $\mathcal{D}(\omega)$ elhangolás adja meg. Vegyük észre, hogy amennyiben a csatolást megszüntetjük, akkor $\rho(\omega) \equiv 0$, ekkor $\operatorname{Re}(z) = \Delta$, azaz a nanovezeték megőrzi a kezdeti rezgési frekvenciáját. Az, hogy csatolás nélkül a pólus valós része nem az ω_{nw} értéket adja abból ered, hogy egy ω_L forgóhullámú képben dolgoztunk.

5.2.4. Közelítő analitikus megoldás

Ebben a fejezetben azt mutatjuk meg, hogyan lehet bizonyos közelítések után analitikusan meghatározni a csatolási sűrűségfüggvényt, majd ennek ismertetében megbecsülni a kollektív csatolási erősség küszöbértékét. A korábban bevezetett csatolási sűrűségfüggvény alakja, ha a

gravitáció hatását elhanyagoljuk

$$\rho(\omega) = \int |\eta(\mathbf{r})|^2 \delta\left(\omega - \frac{V_T(\mathbf{r})}{\hbar}\right) d^3r. \quad (5.111)$$

Tegyük fel, hogy a mágneses tér a kondenzátumon belül lassan változik, és hanyagoljuk el a $\beta(\mathbf{r})$ paraméter helyfüggését. Ekkor $\beta(\mathbf{r}) \equiv \beta(0) \equiv \beta$, azaz a kondenzátum minden pontjában a paramétert a kondenzátum középpontjában mérhető értékkel helyettesítettük. Ez jó közelítés lehet akkor, amikor egy rövid nanovezetéket használunk, azaz a vezeték hossza sokkal kisebb a kondenzátumtól való távolságánál, tehát $L \ll d$. Ekkor a vezeték olyan, mintha egy dipólus lenne, így a mágneses tere közelíthető

$$\mathbf{B}_{\text{nw}}^{\text{dip}}(\mathbf{r}) = \mu_0 I L \frac{\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{r} + \mathbf{d})}{4\pi |\mathbf{r} + \mathbf{d}|^3} \quad (5.112)$$

módon, ahol $\hat{\mathbf{z}}$ a z irányú egységvektor. Ha a fordított esetet nézzük, azaz amikor $L \gg d$, akkor az egy végtelen áramvezetőnek felelne meg, melynek mágneses tere

$$\mathbf{B}_{\text{nw}}^{\text{long}}(\mathbf{r}) = \mu_0 I \frac{\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{r} + \mathbf{d})}{2\pi |\mathbf{r} + \mathbf{d}|^2}. \quad (5.113)$$

Ebben a két határesetben a kondenzátum középpontjában a mágneses térből származó komponens járuléka

$$\beta(0) \equiv \beta = \frac{g_F \mu_B \mu_0 I}{4\pi \sqrt{\hbar} m_{\text{eff}} \omega_{\text{nw}}} \times \begin{cases} L/d^3, & \text{ha } L \ll d, \\ 1/d^2, & \text{ha } L \gg d. \end{cases} \quad (5.114)$$

A \mathbf{B}_{nw} tér konkrét alakja a most következő számolásban nem játszik fontos szerepet, csak azt tételezzük fel, hogy lassan változik, így vehető konstansnak, mint ahogy azt a két imént bemutatott határesetben tehetnénk.

A $\rho(\omega)$ csatolási sűrűségfüggvény kiszámításához térjünk át egy, a probléma szimmetriáit jobban tükröző koordináta-rendszerbe, melyet az

$$x = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{M\omega_r^2}} \sin\vartheta \cos\varphi, \quad y = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{M\omega_r^2}} \sin\vartheta \sin\varphi, \quad z = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{M\omega_z^2}} \cos\vartheta, \quad (5.115)$$

transzformációval írhatunk le. Ez fizikailag megfelel annak, hogy az ε energiájú héjakra integrálunk a kondenzátumon belül, ahol $\varepsilon = \mu - V_T(\mathbf{r})$. A Jacobi-determinánst kiszámolva, az integrálásban

$$d^3r = dx dy dz = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{M^3}} \frac{\sin\vartheta}{\omega_r^2 \omega_z} d\varepsilon d\vartheta d\varphi. \quad (5.116)$$

A transzformáció segítségével az integrált tehát elvégezhetjük,

$$\begin{aligned}\rho(\omega) &= \frac{\eta^2}{g_s} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sqrt{\frac{2\varepsilon}{M^3}} \frac{\sin \vartheta}{\omega_r^2 \omega_z} \varepsilon \delta\left(\omega - \frac{\varepsilon}{\hbar}\right) \mathcal{I}\left(\frac{\varepsilon}{\mu}\right) = \\ &= \frac{4\pi \hbar \eta^2}{g_s \omega_r^2 \omega_z} \sqrt{\frac{2}{M^3}} \sqrt{\hbar\omega} (\mu - \hbar\omega) \mathcal{I}\left(\frac{\hbar\omega}{\mu}\right)\end{aligned}\quad (5.117)$$

alakú, ahol bevezettük az

$$\mathcal{I}(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}\quad (5.118)$$

függvényt. A csatolási sűrűségfüggvény ismeretében kiszámíthatjuk a kollektív csatolási erősséget is,

$$\Omega^2 = \int \rho(\omega) d\omega = \frac{16\pi\eta^2}{15g_s\omega_r^2\omega_z} \sqrt{\frac{2\mu^5}{M^3}}. \quad (5.119)$$

A dimenziótlanított csatolási sűrűségfüggvény alakja

$$\bar{\rho}(x) = \frac{\mu}{\hbar\Omega^2} \rho\left(\frac{\hbar\omega}{\mu}\right) = \begin{cases} \frac{15}{4} \sqrt{x} (1-x), & \text{ha } 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & \text{különben.} \end{cases}\quad (5.120)$$

A fenti eredmények függvényében kiszámíthatjuk az

$$\Omega_{\text{tr}}^2 = \frac{\kappa\mu}{\pi\hbar \max(\bar{\rho}(x))}, \quad \Delta_{\text{tr}} = \frac{\mu x}{\hbar} + \frac{\hbar\Omega_{\text{tr}}^2}{\mu} \mathbb{P} \int \frac{\bar{\rho}(y)}{x-y} dy, \quad (5.121)$$

kritikus csatolási erősséget és a hozzá tartozó elhangolást. A $\bar{\rho}(x)$ függvény a maximumát az $x = 1/3$ helyen veszi fel, értéke pedig $\bar{\rho}(1/3) = 5/(2\sqrt{3}) \approx 1,44$. A főértékintegrált is kiszámíthatjuk, értéke közelítőleg $-0,6$. Ennek függvényében a kritikus csatolási erősséget és a nanovezeték frekvenciájának elhangolódását

$$\Omega_{\text{tr}}^2 \approx \frac{\kappa\mu}{\hbar} \times 0,22, \quad \Delta_{\text{tr}} \approx \frac{1}{3} \frac{\mu}{\hbar} - 0,13 \kappa \quad (5.122)$$

módon írhatjuk. A kapott formulákban a rendszer paramétereinek ismeretében már minden változó értékét ki tudjuk számítani.

Amennyiben maradunk az eddig alkalmazott közelítésben, mely szerint $\beta(\mathbf{r}) \approx \beta$ állandónak vehető a kondenzátum belsejében, de figyelembe vesszük a gravitáció hatását is, akkor mint láttuk, a csatolási sűrűségfüggvény alakja

$$\rho(\omega) = \int |\eta(\mathbf{r})|^2 \delta\left(\omega - \frac{V_T(\mathbf{r}) - Mg_r y}{\hbar}\right) d^3r. \quad (5.123)$$

A korábbi esethez hasonlóan belátható, hogy a gravitáció figyelembevételével

$$\rho(\omega) = \frac{2\hbar\eta^2}{g_s\omega_r^2\omega_z} \sqrt{\frac{\mu^3}{M^3}} \mathcal{R}\left(\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\mu} + v^2}, v\right), \quad (5.124)$$

ahol v a korábban az (5.67) egyenletben bevezetett dimenziótlán paraméter a gravitációs eltolódás mértékének jellemzésére, valamint

$$\mathcal{R}(x, y) = x\Theta(x) \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin(\theta) (1-x^2-y^2-2xy \sin \theta \sin \varphi) \Theta(1-x^2-y^2-2xy \sin \theta \sin \varphi), \quad (5.125)$$

ahol $\Theta(x)$ ismét a Heaviside-függvény. Belátható, hogy az $\Omega^2 = \int \rho(\omega) d\omega$ kollektív csatolási állandó nem függ a v paramétértől. Az $\mathcal{R}(x, y)$ függvény tartója (azaz azon pontok halmaza, melyekben a függvény értéke nem nulla) a $v \in [0, \infty[$ és az $u \in [\max(0, v-1), v+1]$ intervallumok által megadott halmaz. Ebből következik, hogy a $\rho(\omega)$ csatolási állandó tartója az $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ intervallum, ahol

$$\omega_{\min} = \begin{cases} -\mu v^2/\hbar & \text{ha } v < 1, \\ \mu(1-2v)/\hbar & \text{ha } v \geq 1, \end{cases} \quad \omega_{\max} = \mu(1+2v)/\hbar. \quad (5.126)$$

Vegyük észre, hogy ha a gravitációt elhanyagoljuk, azaz $v = 0$, akkor $\omega_{\min} = 0$ és $\omega_{\max} = \mu/\hbar$, mely megfelel az (5.117) egyenletben szereplő függvény tartójának.

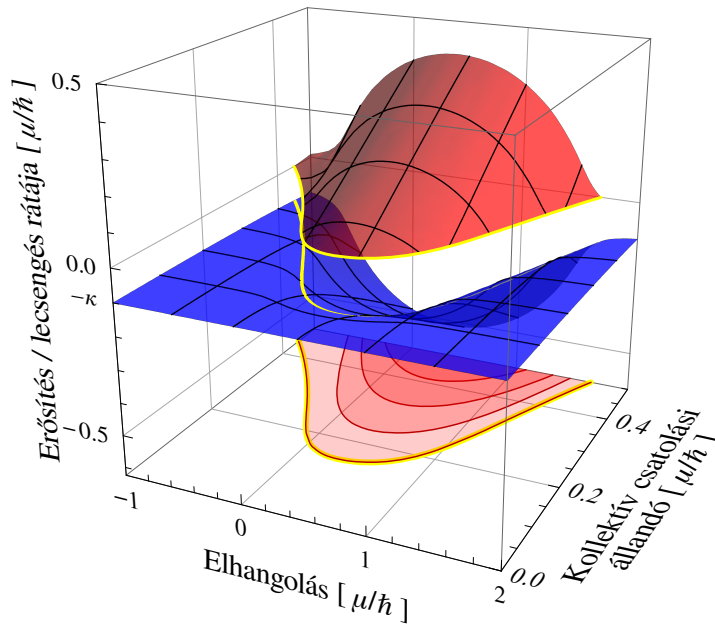
5.2.5. Numerikus eredmények

Az analitikus megoldás illusztrálása

Az 5.2.3 fejezetben említettük, hogy az (5.101) karakterisztikus egyenlet direkt megoldása helyett azt fogjuk megnézni, hogy adott Ω kollektív csatolási erősség és Δ elhangolás esetén milyen z komplex számok elégítik ki a karakterisztikus egyenletet. Mivel a z pólus valós része a nanovezeték elhangolódását, a képzetes része pedig a mechanikai rezgés amplitúdója erősítésének rátáját adja meg, ezért az (5.104) és (5.107) egyenleteknek megfelelően vizsgáljuk külön a valós és képzetes részt abban a közelítő esetben, melyet az előző fejezetben bemutattunk, így felhasználhatjuk a $\bar{\rho}(x)$ dimenziótlánított csatolási sűrűségfüggvény (5.120) alakját.

Az 5.5 ábrán a $\tilde{G}_{aa}^+(z)$ propagátor pólusainak képzetes részét ábrázoltuk az Ω kollektív csatolási erősség és Δ kezdeti elhangolás függvényében, miközben a $\kappa = 0.1\mu/\hbar$ értéket használtuk. Az ábrán a kék szín a negatív képzetes részeket jelöli, melyek a lecsengés rátáját adják

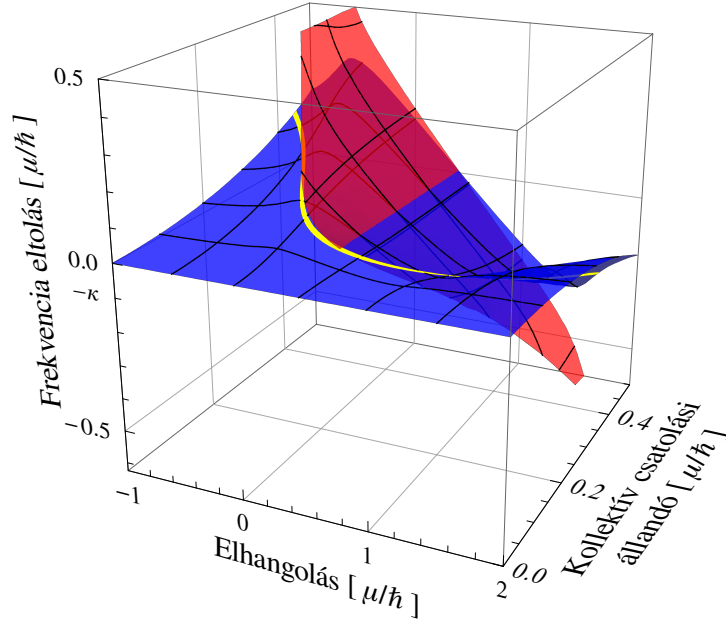
meg. Vegyük észre, hogy amikor az $\Omega = 0$ síkon vagyunk, akkor minden elhangolás esetén $\text{Im}(z) = -\kappa$, azaz a nanovezeték a saját csillapodási tényezője szerint az idő múlásával az alapállapotába kerül. Egészen addig nem tapasztalunk erősítést, amíg nem kompenzáljuk a veszteségeket, azaz a csatolási erősségben el nem érünk egy (a Δ elhangolástól függő) kritikus értéket, amikor is megjelennek pozitív képzetes részek. Az ábrán ezt a paramétertartományt sárga vonallal jelöltük. Amennyiben $\Omega > \Omega_{\text{tr}}$, akkor elérünk a parametrikus erősítésért felelős paramétertartományba, itt már vannak pozitív képzetes részek, melyeket az ábrán piros színnel jelöltünk.



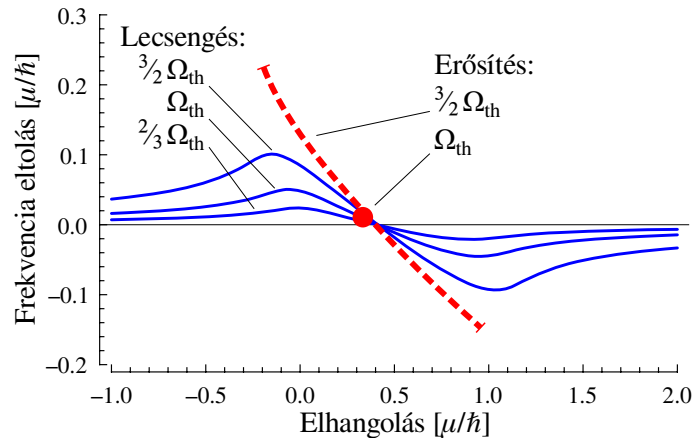
5.5. ábra. Az erősítés (pirossal, pozitív értékek) és a lecsengés (késsel, negatív értékek) rátája a Δ csatolás nélküli elhangolás és az Ω kollektív csatolási erősség függvényében, melyet az (5.76) propagátor pólusainak képzetes részei adnak meg. Az ábrán sárga vonallal jelöltük azon értékeket, melyek azokhoz a paraméterekhez tartoznak amikor elérjük a kollektív csatolási állandó küszöbértékét az (5.122) egyenletnek megfelelően.

Az 5.6 ábrán a pólusok valós részeiből származtatott elhangolást ábrázoltuk a csatolási erősség és az elhangolás függvényében, hasonlóan ez előző ábrához. Itt is jól látható, hogy amennyiben $\Omega = 0$ (csatolásmentes eset) nincs elhangolás. Az ábrán késsel jelöltük azokat az értékeket, amelyek esetén a képzetes rész negatív, míg pirossal azokat, amelyekhez pozitív képzetes rész tartozik. A sárga vonal ismét azt jelzi, hogy mikor értük el a küszöböt a csatolási állandó értékében.

Az 5.7 ábrán adott Ω kollektív csatolási erősség mellett ábrázoltuk a Δ kezdeti elhangolás függvényében a nanovezeték rezgési frekvenciájának eltolását. A különböző kék színű görbék



5.6. ábra. Az nanovezeték frekvenciaeltolódása a Δ elhangolás és az Ω kollektív csatolási erősség függvényében, melyet az (5.76) propagátor pólusainak valós részeiből származtathatunk. Az ábra az 5.5 ábra megfelelője a valós részekre. A kék szín azokhoz az értékekhez tartozik, amelyek esetén a képzetes rész negatív, a piros színnel jelzett értékekhez pozitív képzetes rész társul. A sárga vonal ismét azt jelzi, hogy mikor értük el a küszöböt a csatolási állandó értékében.



5.7. ábra. A nanovezeték kezdeti rezgési frekvenciájának elhangolódása a Δ elhangolás függvényében, melyet az (5.76) egyenlet domináns pólusának valós része ad meg. A folytonos kék görbék azon pólusokból eredő elhangolást adják, melyek képzetes része negatív, a szaggatott piros vonal pedig azokhoz az értékekhez tartozik, melyhez pozitív képzetes rész tartozik. A különböző görbék különböző kollektív csatolási erősségekhez tartoznak. Az ábra lényegében az 5.6 ábra metszeteinek felel meg.

különböző Ω értékekhez tartoznak, melyek képzetes része negatív. A piros színnel jelzett görbék a korábbiakhoz hasonlóan a pozitív képzetes részekhez tartoznak. Az ábra lényegében a 5.6 ábra metszeteinek felel meg.

Az oszcillátor elhangolódását széles körben használják nanoelektromechanikai rendszerekben (*NEMS*) arra, hogy az oszcillátorra (például szén nanocsőre) tapadt extra részecskék (például egyedi molekulák) tömegét meghatározzák, akár joktogramm (10^{-27} kg) pontossággal [183, 184, 228, 236]. Az általunk bemutatott modellben az elhangolás a magnetomechanikai csatolás vizsgálatára alkalmazható, segítségével kimutatható a rendszerben megjelenő parametrikus erősítés.

Realisztikus modell

Az előző fejezetekben megmutattuk, hogy a rezgő, áramjárta nanovezeték és a Bose-Einstein kondenzátum mágnesesen csatolt rendszerében hogyan írhatjuk fel a csatolás fizikai modelljét, valamint egy egyszerűsített modellen analitikusan megmutattuk, hogy a csatolási erősség növelésével hogyan érhetjük el a nanovezeték mechanikai rezgésének parametrikus erősítését. Ez a közelítő modell alkalmas volt arra, hogy megértsük a jelenség fizikai hátterét, és a mögötte álló alapgondolatokat. Ebben a fejezetben a közelítő modellen továbblépünk, és realisztikus paramétereket véve megmutatjuk, hogy a bemutatott parametrikus erősítés laboratóriumi körülmények között meg is valósítható a szakirodalomban már publikált kísérleti elrendezésekben bemutatott paramétereket alapul véve.

A programban elsőként az 5.2.1 fejezetben bemutatott módon diszkrétizáltuk a kondenzátumot, azaz $\Delta v = dx^3$ térfogatú cellákra osztottuk. A konkrét futtatás során kocka alakú cellákat használtunk, $dx = 8.5$ nm élhosszal. Minden egyes cellára kiszámoltuk a cella térbeli középpontjában az η_x csatolási állandót, és feltettük, hogy ez a cella belsejében állandó. Az Ω kollektív csatolási állandó (5.94) definíciója alapján a kondenzátum térfogatára felösszegezve a kapott csatolási állandókat megkapjuk a kollektív csatolási állandót. Ahhoz, hogy eldönthessük, hogy az adott rendszer esetében a parametrikus erősítés megvalósul-e, meg kell határoznunk az (5.106) egyenlettel definiált Ω_{tr} kritikus csatolási állandót, valamint az ehhez szükséges dimenziótlanított $\bar{\rho}(x)$ csatolási sűrűségfüggvényt. Tudjuk, hogy a csatolási sűrűségfüggvény tartója az $[\omega_{min}, \omega_{max}]$ intervallum, így a (5.93) egyenletben szereplő, a $\rho(\omega)$ csatolási sűrűségfüggvény definiálásakor felhasznált Dirac-deltát figyelembe vehetjük úgy, hogy az intervallumot adott, például 100 egyenlő tartományra osztjuk, és megnézzük, hogy egy adott cella ezek közül melyikbe ad járulékot. Ily módon elő tudjuk állítani a $\bar{\rho}(x)$ függvényt, és meg tudjuk határozni a maximumát.

Elsőként tekintsük át, milyen paramétereket választottunk a kondenzátum leírására. Nume-

rikus modellünkben feltettük, hogy egy atomchip segítségével $N = 50\,000$ darab ^{87}Rb atomot csapdáztunk, a mágneses csapdát jellemző csapdafrekvenciák pedig $\omega_r = 2\pi \times 1500$ Hz és $\omega_z = 2\pi \times 300$ Hz [214, 216]. A csapdafrekvenciák és a csapdázott atomok számának megválasztásakor ügyelni kell arra, hogy túl sűrű kondenzátumot véve előfordulhat olyan eset, amikor a két- illetve három-részecske ütközések miatt lecsökken a kondenzátum élettartama [237, 238]. A kondenzátumból származó veszteségek domináns része is a három-részecske ütközésekből származik, így meg tudjuk becsülni a csapdázott atomok veszteségi rátáját [42, 238]. Ebből következtethetünk a kondenzátumból gerjesztett atomok veszteségi rátájának nagyságrendjére is, mely a választott paraméterek esetén $\gamma \approx 12\text{ s}^{-1}$. Ez az érték több nagyságrenddel kisebb a kondenzátum (5.14) kémiai potenciáljából számolt $\Gamma = \mu/\hbar = 2\pi \times 18.23$ kHz értéknél, tehát jogosnak nevezhetjük az elméleti formulák levezetésénél használt $\gamma \ll \Gamma$ közelítést.

Most tekintsük át a nanovezeték modellezésére használt paramétereket. Az eddig bemutatott modell és az analitikus közelítő megoldás tetszőleges olyan oszcillátorra érvényes, mely áramot tud vezetni. Ebben a fejezetben a nanovezetéket egy szén nanocsőnek vettük, mivel a szén nanostruktúrák széles körű irodalommal rendelkeznek, fizikai tulajdonságaik pedig, mint látni fogjuk, alkalmassá teszik őket arra, hogy nagy jósági tényezőjű áramvezető oszcillátorként használjuk őket. A nanocső jósági tényezője egy friss eredmény szerint akár 10^6 nagyságrendű is lehet [239], mi a számításainkhoz $Q = 2.5 \times 10^5$ értéket használtunk [240], ebből a nanocső csillapítási tényezője $\kappa = \omega_{\text{nw}}/Q = 2\pi \times 2.2$ Hz. Modellünkben feltettük, hogy a nanocső $L = 2\text{ }\mu\text{m}$ hosszú, az alaplódban rezeg [227, 228], és $m_{\text{eff}} = 7 \times 10^{-21}$ kg effektív tömeggel rendelkezik [182, 228, 241]. A csatolás a nanocső keltette mágneses téren keresztül történik, a mágneses teret pedig az okozza, hogy a nanocső $\omega_{\text{nw}} = 2\pi \times 550$ kHz frekvenciával rezeg [182, 229], miközben $I = 35\text{ }\mu\text{A}$ áramot vezetünk keresztül rajta [242]. A nanocső távolságát a kondenzátum középpontjától $d = 1.67\text{ }\mu\text{m}$ -nek választottuk, ügyelve arra, hogy a két rendszer között elegendő távolság maradjon ahhoz, hogy a felületek között fellépő kölcsönhatást (például a Casimir-Polder potenciált) elhanyagolhassuk [190, 191, 243].

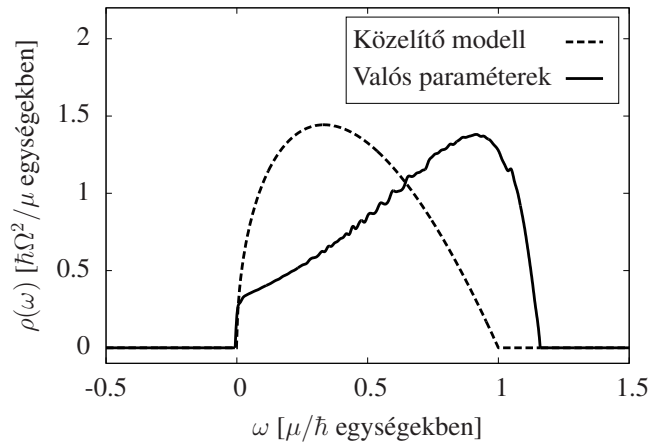
Mivel valós fizikai paramétereket keresünk, így nem hanyagolhatjuk el a nanocső hőmérsékletét sem. Ha feltesszük, hogy a nanocső kezdetben termikus állapotban van [209], akkor szobahőmérsékleten ($T = 293\text{ K}$) a termikus fononszám

$$\langle \hat{n} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_{\text{nw}}) - 1} \approx 1.1 \times 10^7, \quad (5.127)$$

ahol $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B pedig a Boltzmann-állandó. Ez az érték jóval nagyobb, mint a konden-

zátumban található atomok száma. Ahhoz, hogy a parametrikus erősítésből származó amplitúdónövekedést közvetlenül láthassuk, le kell hűtenünk a nanocsövet [230]. Ha a hőmérsékletet levisszük $T = 15$ mK értékre [239, 240], akkor a termikus gerjesztések száma már csak közelítőleg 570.

Az 5.8 ábrán a fenti paraméterekkel számított $\bar{\rho}(x)$ dimenzióatlanított csatolási sűrűségfüggvényt ábrázoltuk folytonos vonallal, valamint az (5.120) elméleti eredmény látható szaggatott vonallal. A kollektív csatolási állandó küszöbértékének kiszámításához az ábrázolt függvény maximumára van szükségünk, az pedig mint láthatjuk közel esik a kétféle módon kapott görbe esetén. Az (5.122) összefüggés alapján az analitikus modellben $\hbar\Omega_{\text{tr}}^2(\kappa\mu) \approx 0.22$, míg a numerikus eredményekre ez közelítőleg 0.23.



5.8. ábra. A $\rho(\omega)$ csatolási sűrűségfüggvény különböző esetekben. Szaggatott vonal jelöli az (5.117) egyenletben szereplő közelítő analitikus formulát, míg a folytonos görbe a realisztikus paramétereken alapuló numerikus eredményeket mutatja.

A kollektív csatolási állandó küszöbértéke a numerikus eredmények szerint az (5.121) egyenlet alapján $\Omega_{\text{tr}} \approx 605 \text{ s}^{-1}$, a kollektív csatolási állandó értéke pedig $\Omega = 710 \text{ s}^{-1}$, tehát a küszöbérték felett vagyunk, ezen paraméterek mellett a rendszerben *létrejön a parametrikus erősítés*.

A paraméterek ismeretében megnézhetjük azt is, mennyire jelentős a gravitáció hatása. Ennek karakterizálására korábban bevezettük a v mennyiséget (ld. (5.67) egyenlet), ami azt adja meg, hogy a kondenzátum középpontjának eltolódása hogyan arányul a kondenzátum féltengelyének méretéhez. Az általunk ebben a pontban vizsgált rendszer esetén $v = 0.08$, azaz a kondenzátum középpontja a gravitáció hatására csak kis mértékben tolódik el, a gravitációs eltolódás a kondenzátum féltengelyének körülbelül 8 %-a.

5.3. Következtetések

A dolgozat ezen részében Bose-Einstein kondenzátum és áramjárta, rezgő nanovezeték közti magnetomechanikai csatolást mutattam be, mely az általunk vizsgált modellben a nanovezeték mechanikai rezgésének parametrikus erősítésére vezet. A kapott Hamilton-operátor analógiát mutat az optikai parametrikus erősítés leírására használt Hamilton-operátorral, azonban az általunk vizsgált esetben az egyik oszcillátor helyett egy inhomogén kiszélesedett közeggel kellett dolgoznunk.

A rendszerben a kondenzátumból gerjesztett atomok és a nanovezeték részéről is adódnak veszteségek, így a parametrikus erősítés csak akkor jön létre, ha a kollektív csatolási állandó egy kritikus küszöbértéknél nagyobb, kompenzálva ezzel a veszteségeket. Abban az esetben, amikor feltesszük, hogy a kondenzátumon belül a nanovezeték keltette mágneses tér amplitúdója állandónak tekinthető, a csatolási sűrűségfüggvény analitikusan felírható, így egy alsó korlátot adtunk a kollektív csatolási állandó küszöbértékére. A kollektív csatolási állandó mellett analitikusan meghatározható a nanovezeték rezgési frekvenciájának elhangolódása is, mely elég nagy lehet ahhoz, hogy egy jól mérhető mennyiségként szolgáljon a csatolás és a parametrikus erősítés kimutatására.

Realisztikus paraméterek használatával figyelembe vettük a mágneses tér egzakt alakját, és numerikusan meghatároztuk a csatolási sűrűségfüggvényt, valamint a kritikus csatolási erősséget. Azt kaptuk, hogy az általunk választott paraméterek esetén létrejön a rendszerben a kritikus csatolási erősség, a kollektív csatolási állandó meghaladhatja a küszöbértéket.

A bemutatott csatolás a két kvantumrendszer között megnyitja az utat a nanovezeték mechanikai rezgésének vezérléséhez. Amennyiben a kondenzátumot nem a bemutatott mágneses csapdában, hanem egy olyan csapdában alakítjuk ki, mely mindhárom Zeeman alnívót csapdázza, akkor egy külső térrel a hiperfinom nívókat vezérelve a nanovezeték rezgését is befolyásolhatjuk.

Oszcillátorként használt szén alapú nanostruktúrákban, mint amilyenek például a szén nanocsövek és a grafén, a rezgési frekvencia elhangolódása és a csillapodás leírása nem triviális, mérések szerint bizonyos esetekben egy nemlineáris tagot is figyelembe kell venni a κ csillapítási tényezővel leírt lineáris csillapítás mellett [244–246]. Ezen nemlineáris tag modellünkre gyakorolt hatását célszerű lehet a későbbiekben megvizsgálni. A csillapítás részletes fizikai modellje még nem ismert, így egy adott kísérleti elrendezésben az általunk javasolt csatolt hibrid

kvantumrendszerben a csatolási erősség értékének változtatásával akár ezt is lehetne tanulmányozni, hiszen a parametrikus erősítés akkor lép fel, amikor a veszteségeket kompenzáltuk.

Összefoglalás

Dolgozatomban két témakörrel foglalkoztam, az egyik a folytonos idejű kvantumos bolyongások dinamikai és transzportulajdonságainak vizsgálata különböző gráfok esetén, a másik pedig a Bose-Einstein kondenzátum és nanoméretű áramvezető mágnesesen csatolt rendszerében fellépő parametrikus erősítés vizsgálata volt.

A folytonos idejű kvantumos bolyongás (CTQW) esetén azt vizsgáltam meg, hogy hogyan lehet leírni a rendszer dinamikáját abban az esetben, amikor a bolyongást meghatározó gráfot dinamikusan, azaz a bolyongás közben véletlenszerűen változtatjuk. Ez azt jelenti, hogy az egyes, a gráfban lévő éleket egy, a perkolációt jellemző valószínűség szerint elveszük vagy megtartjuk. Az irodalomban a diszkrét idejű kvantumos bolyongás (DTQW) esetén már felvetették ezt a kérdést, és azt találták, hogy sok lépés után a rendszer a kezdőállapottól függően adott végállapothoz tart, és maradhat koherencia a rendszerben. Mivel a vizsgált folyamat időfejlődése diszkrét időlépésekkel írható le, ezért a sok lépés utáni konvergencia a végállapothoz hosszú idő elteltével figyelhető meg. Az általam vizsgált kérdéskör ettől az esettől alapjában eltér. A CTQW esetén kihasználva azt, hogy bármikor léphetünk, a sok lépésnek megfeleltethető az az eset, amikor adott idő alatt sokszor megváltoztatjuk a gráfot. Ez felfogható úgy, hogy sok lépést teszünk, hiszen a folytonos idejű kvantumos bolyongás esetén a lépés fogalma a perkolációmentes esetben nincs definiálva, mivel az időfejlődés folytonos. Ezt a gyors perkolációval leírt esetet a DTQW dinamikája nem tesz lehetővé, ott a gráf két megváltozása közötti időtartam nem lehet kisebb a bolyongás időfejlődését megadó lépésköznél.

Dolgozatomban megvizsgáltam az egyes perkolált gráfok Laplace-mátrixának a Hamilton-operátor mátrix reprezentációjába adott járulékát abban az egzakt matematikai esetben, amikor a gráf két egymást követő megváltozása közötti időtartammal nullához tartunk. Ebben a határesetben mind egy adott rendszer időfejlődését nézve, mind pedig a szuperoperátorok használatával átlagolt dinamika esetén analitikusan megmutattam, hogy a rendszer dinamikája egyszerű, zárt alakban megadható, a perkoláció az idő átskálázásában jelentkezik, a skálázást pedig egy

adott él elvételének valószínűsége határozza meg, mely a perkolációra jellemző, modellünkben előre megadott paraméter [I].

Valós fizikai rendszerekben nem változhat végtelenül gyorsan a gráf, ezért numerikusan megvizsgáltam az elméleti modell érvényességi tartományát. Ez azt jelenti, hogy azt az esetet tanulmányoztam, amikor a gráf két megváltozása közötti időtartam kicsi, de véges. Eredményeim azt mutatják, hogy a bolyongás kezdeti időfejlődését az általam analitikusan levezetett, a perkolációt jellemző valószínűséggel átskálázott időben vett hullámfüggvény írja le mind egy rendszert nézve, mind pedig az átlagolt dinamika esetén. A modell kezdeti érvényességi tartományán túllépve egy rendszer esetén egy random unitér időfejlődést kapunk, az összes lehetséges trajektóriára átlagolva pedig a DTQW esetén tapasztalt konvergencia figyelhető meg. Numerikusan megmutattam, hogy a gráf két megváltozása közötti időtartamot gondosan megválasztva az általam felállított elméleti modell érvényességi tartománya tetszőlegesen nagy időintervallumra kiterjeszthető [I].

A dolgozat következő kutatási témájaként a Prof. Alexander Blumen (Universität Freiburg) által vezetett csoporttal együttműködve a folytonos idejű kvantum bolyongás transzporttulajdonságait vizsgáltam Sierpiński-fraktálok, nevezetesen a Sierpiński-háromszögön és a Sierpiński-szőnyegen, valamint ezek duálisán. Az említett struktúrák determinisztikus fraktálok, azaz egy iterációval megadható, hogy hogyan tudjuk felépíteni őket egy kezdeti blokk adott szabály szerinti ismétlődéséből. Azt, hogy a felépítés során hanyadik lépésben tartunk, a gráf generációjának hívjuk. A bolyongás dinamikájának analitikus leírása meglehetősen bonyolult már véges generációs gráfokra is. Ez azzal magyarázható, hogy a gráfban található csúcsok száma a generációs szám exponenciális függvénye, valamint nagyon különleges a gráfot leíró szomszédsági mátrix. Alkalmas numerikus módszereket választva, például kihasználva azt, hogy a szomszédsági mátrix egy ritka mátrix, a vizsgált mennyiségek generációnkénti viselkedését numerikusan modellezni tudjuk, a generációnkénti viselkedésből pedig következtetni tudunk az egzakt, végtelen fraktálon zajló dinamikára, hiszen egyre nagyobb és nagyobb generációjú gráfot véve a bolyongó egyre később érzi meg a gráf véges méretéből adódó határfeltételeket, így egyre hosszabb időintervallumban tudjuk tanulmányozni az egzakt fraktálon történő bolyongás tulajdonságait.

Dolgozatomban numerikusan megvizsgáltam a Sierpiński-háromszögön, a Sierpiński-szőnyegen, valamint a gráfok duálisán történő folytonos idejű kvantum bolyongás esetén az átlagos visszatérési amplitúdót, mely az átlagos visszatérési valószínűség alsó burkolóját határozza

meg. A klasszikus bolyongás esetén a visszatérési valószínűség véges gráfra az egyensúlyi értékhez tart, a rendszer méretével a végtelenbe tartva pedig nullához. Ezen lecsengés klasszikus rendszerekre nem túl kis időtartamokra az egyensúlyi érték eléréséig az idő hatványfüggvénye szerint történik, a kitevőt pedig az adott gráfra jellemző spektrál dimenzió adja meg. Eredményeim azt mutatják, hogy kvantum bolyongás esetén a Sierpiński-háromszögön és duálisán lokalizáció figyelhető meg, a visszatérési valószínűség a generációk számát növelve nem tart nullához, hanem egy véges érték körül oszcillál. Ez azt jelenti, hogy ilyen gráfokra a bolyongás a transzportfolyamatok szempontjából nem hatékony. A vizsgált Sierpiński-szőnyeg és a duálisa sokkal hatékonyabbnak bizonyult a kvantum transzport szempontjából, a vizsgált generációk esetén nem tapasztaltam lokalizációt az átlagos visszatérési valószínűségben, a klasszikus bolyongás esetén pedig a szimuláció az elméletileg várt, spektrál dimenzió szerinti lecsengést mutatta [III].

A lokalizáció a vizsgált Sierpiński-fraktálok Laplace-mátrixának spektrumával is kapcsolatban áll. Amennyiben van legalább egy olyan sajátérték, ami erősen degenerált, akkor az átlagos visszatérési valószínűség nem tart nullához. Az, hogy egy sajátérték erősen degenerált azt jelenti, hogy ha minden generációra azt a számot, hogy az adott sajátérték hányszorosan degenerált elosztjuk a gráfban található csúcsok számával, akkor az így kapott mennyiség a generációk számát növelve nem tart nullához. A Sierpiński-háromszögre és a duálisára az általam vizsgált generációkra megmutattam, hogy mely sajátérték degenerált, és a spektrumból kiszámítottam az átlagos visszatérési valószínűség időátlagát, mely értékek egy véges értékhez tartó sorozatot alkottak, alátámasztva ezzel a lokalizációt. A Sierpiński-szőnyegek esetén a spektrum vizsgálata azt mutatta, hogy bár az átlagos visszatérési amplitúdóban nem láttunk lokalizációra utaló jelet, a spektrumban mégis van olyan sajátérték, ami erősen degenerált lehet nagyobb generációk esetén is. A jelenleg rendelkezésemre álló számítási kapacitás korlátai miatt (a következő, a dolgozatban tárgyaltnál eggyel nagyobb generációhoz tartozó gráf Laplace-mátrixának mérete $300\,000 \times 300\,000$ -nél nagyobb) egyértelmű kijelentést ezzel kapcsolatban jelenleg nem tudunk tenni. Az eredményeim azt mutatják, hogy lehetséges lokalizáció, ezért ezt a kérdést analitikus módszerekkel, a gráf struktúráját kissé megváltoztatva érdemes lehet megvizsgálni.

A transzport hatékonyságát, és a lokalizáció jelenlétét úgy is lehet vizsgálni, hogy a rendszerben csapdákat helyezünk el, és azt nézzük, hogy milyen valószínűséggel marad a rendszerben a bolyongó, és milyen valószínűséggel csapdázódik. Annak a valószínűségét, hogy a bolyongó adott időpillanatig még nem csapdázódott túlélési valószínűségnek nevezzük, ha pedig

azt kérdezzük, hogy mi a valószínűsége annak, hogy örökre a rendszerben marad a bolyongó akkor aszimptotikus túlélési valószínűségről beszélünk. A csapdázott rendszer Hamilton-operátorának mátrixa nem hermitikus, így lehetnek valós és komplex sajátértékei. Az aszimptotikus túlélési valószínűség meghatározásához a tisztán valós sajátértékek számának ismerete szükséges. Mivel ennek megválaszolásához numerikusan azt vizsgáljuk, hogy hány képzetes rész nulla, ezért a német fél munkáját kiegészítettem azzal, hogy írtam egy négyszeres (quadruple) pontossággal működő FORTRAN kódot a sajátértékek kiszámítására. Ezzel az eredményekben néhány százalékos pontosítást értem el, valamint több nagyságrenddel csökkentettem a numerikus eredmények hibáját is [III].

Dolgozatom második részében egy hibrid kvantummechanikai rendszert tanulmányoztam, melyben egy atomchip segítségével csapdázott Bose–Einstein kondenzátum és az atomchipe rögzített, rezgő, áramjárta nanovezeték közti magnetomechanikai kölcsönhatást vizsgáltam. A két rendszer közötti kölcsönhatást a rezgő nanovezeték keltette váltakozó mágneses tér okozza: egy külső mágneses tér segítségével a kondenzált atomok Zeeman-alnívóinak degeneráltsága megszüntethető, a Larmor-frekvencia megfelelő választásával pedig elérhető, hogy a rezgő nanovezeték keltette mágneses tér spin átmeneteket okozzon a kondenzátumban.

A Biot-Savart-törvény felhasználásával egzaktul kiszámítottam ezt a mágneses teret, és ennek segítségével felírtam a két rendszer közti csatolást. A számítás során felhasználtam, hogy a kondenzátumot Thomas-Fermi közelítésben egy valós hullámfüggvénnyel írtuk le, mely kielégíti a Gross-Pitaevskii-egyenletet, valamint hogy a nanovezetéket lehet kvantált harmonikus oszcillátorként modellezni. Ez a leírásmód és a kapott Hamilton-operátor alakja analógiát mutat a kvantumoptika irodalmából ismert optikai parametrikus erősítéssel, azzal a különbséggel, hogy az általam vizsgált rendszerben nem két oszcillátort csatoltunk egymáshoz, hanem a nanovezetéket, mint kvantált oszcillátort egy inhomogén kiszélesedett közeghez, a kondenzátumhoz.

Az optikai parametrikus erősítés esetén ismert, hogy az erősítés csak akkor jön létre, ha a rendszerek közötti csatolási állandó egy kritikus küszöbértéknél nagyobb. Ez abból ered, hogy a csatolásból származó energianyereségnek kompenzálnia kell a rendszerben fellépő veszteségeket. Ez a viselkedés a vizsgált hibrid kvantumrendszerben is tetten érhető. Az általam felírt Hamilton-operátor segítségével a nanovezeték és a kondenzátum dinamikáját megadó Heisenberg-Langevin-egyenleteket felírva azok formálisan megoldhatók a megfelelő Green-függvények segítségével. A nanovezeték dinamikáját megadó Green-függvény komplex analitikus tulajdonságait megvizsgálva az inhomogén kiszélesedett közeggel való munka miatt be-

vezetett kollektív csatolási állandó küszöbértéke analitikusan meghatározható, ha feltesszük, hogy a kondenzátumon belül a mágneses tér nem változik. A mágneses tér egzakt formájának felhasználásával analitikusan nem tudjuk meghatározni a küszöbértéket. Dolgozatomban az irodalomban előforduló, hasonló rendszerek esetén mért reális paraméterek felhasználásával numerikusan kiszámítottam a két rendszer csatolását leíró csatolási sűrűségfüggvényt, valamint ennek segítségével a kollektív csatolási állandót, illetve annak küszöbértékét. Azt kaptam, hogy a reális paramétereken alapuló eredmények nagyon jó összhangban vannak a közelítő analitikus megoldással, és hogy az általam felhasznált paramétereket véve létrejöhét egy valós kísérleti elrendezésben a parametrikus erősítés [\[III\]](#).

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, *Kiss Tamásnak*, valamint *Domokos Péternek* és *Kálmán Orsolyának* az érdekes témafelvetésért, valamint a munkámban nyújtott segítségért, hasznos tanácsokért. Köszönettel tartozom *Csordás Andrásnak* is hasznos tanácsaiért. Továbbá köszönetet szeretnék mondani *Anastasiia Anishchenkónak*, *Oliver Müllenek* és *Alexander Blumennek* a közös publikációnkban vállalt munkájukért. Szintén köszönet illeti *Fortágh Józsefet*, aki a kísérleti fizikában szerzett tapasztalatának köszönhetően hasznos tanácsaival segítette a munkámat. Köszönettel tartozom az Eötvös Loránd Tudományegyetemnek, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontnak és a Kvantummérés Kutatócsoportnak, amiért kutatásaimhoz, illetve a dolgozat megírásához nyugodt légkört, valamint anyagi támogatást nyújtottak. Külön köszönetet szeretnék mondani *Kurucz Zoltánnak*, aki a Green-függvények alkalmazásában szerzett szaktudásával járult hozzá a közös munkánkhoz. Köszönettel tartozom továbbá *Asbóth Jánosnak* hasznos szakirodalmi tanácsaiért.

Az értekezés alapjául szolgáló kutatáshoz anyagi támogatást nyújtott a Magyar Tudományos Akadémia Lendület programja (LP2011-016), valamint az OTKA (K83858 és NN109651). A német kutatócsoportokkal való együttműködést anyagiilag a MÖB-DAAD támogatta (40018 és 29690 szerződésszámokon).

Publikációs jegyzék

A dolgozatban bemutatott publikációk:

- [I] Z. Darázs and T. Kiss,
Time evolution of continuous-time quantum walks on dynamical percolation graphs,
J. Phys. A: Math. Theor. **46**, 375305 (2013)

- [II] Z. Darázs, A. Anishchenko, T. Kiss, A. Blumen and O. Mülken,
Transport properties of continuous-time quantum walks on Sierpinski fractals,
Phys. Rev. E **90**, 032113 (2014)

- [III] Z. Darázs, Z. Kurucz, O. Kálmán, T. Kiss, J. Fortágh and P. Domokos,
Parametric amplification of the mechanical vibrations of a suspended nanowire by magnetic coupling to a Bose–Einstein condensate,
Phys. Rev. Lett. **112**, 133603 (2014)

További publikációk:

- [IV] Z. Darázs and T. Kiss,
Pólya number of the continuous-time quantum walks,
Phys. Rev. A **81**, 062319 (2010)

- [V] P. Adam, Z. Darázs, T. Kiss, M. Mechler,
Double self-Kerr scheme for optical Schrödinger-cat state preparation,
Phys. Scr. **T143**, 014002 (2011)

- [VI] P. Adam, T. Kiss, Z. Darázs, I. Jex,
Conditional generation of optical Schrödinger cat states,
Phys. Scr. **T140**, 014011 (2010)

Irodalomjegyzék

- [1] W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover Books on Physics and Chemistry, Dover Publications (1949)
- [2] G. Pólya, *Über eine Aufgabe der Wahrscheinlichkeitsrechnung betreffend die Irrfahrt im Strassennetz*, Mathematische Annalen, **84**, 1, 149 (1921)
- [3] K. Pearson, *The Problem of the Random Walk*, Nature, **72**, 1865, 294 (1905)
- [4] P. Révész, *Random Walk in Random and Non-random Environments*, World Scientific (2005)
- [5] P. Mörters and Y. Peres, *Brownian Motion*, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press (2010)
- [6] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, World Scientific (1992)
- [7] G. M. Viswanathan, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, E. J. Murphy, P. A. Prince, and H. E. Stanley, *Lévy flight search patterns of wandering albatrosses*, Nature, **381**, 413 (1995)
- [8] T. Geszti, *Kvantummechanika*, Typotex Kft (2007)
- [9] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury, *Quantum random walks*, Phys. Rev. A, **48**, 1687 (1993)
- [10] K. Manouchehri and J. Wang, *Physical Implementation of Quantum Walks*, Quantum Science and Technology, Springer (2013)
- [11] D. Meyer, *From quantum cellular automata to quantum lattice gases*, Jour. Stat. Phys., **85**, 5-6, 551 (1996)
- [12] D. Meyer, *On the absence of homogeneous scalar unitary cellular automata*, Phys. Lett. A, **223**, 5, 337 (1996)
- [13] E. Farhi and S. Gutmann, *Quantum computation and decision trees*, Phys. Rev. A, **58**, 915 (1998)
- [14] T. Liggett, *Continuous Time Markov Processes: An Introduction*, Graduate studies in mathematics, American Mathematical Society (2010)
- [15] F. Strauch, *Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks*, Phys. Rev. A, **74**, 030301 (2006)
- [16] A. Childs, *On the Relationship Between Continuous- and Discrete-Time Quantum Walk*, Commun. Math. Phys., **294**, 2, 581 (2010)

- [17] C. Chandrashekar, S. Banerjee, and R. Srikanth, *Relationship between quantum walks and relativistic quantum mechanics*, Phys. Rev. A, **81**, 062340 (2010)
- [18] O. Mülken and A. Blumen, *Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks*, Phys. Rep., **502**, 2–3, 37 (2011)
- [19] X. Xu, Y. Ide, and N. Konno, *Symmetry and localization of quantum walks induced by an extra link in cycles*, Phys. Rev. A, **85**, 042327 (2012)
- [20] J. Steif, *A Survey of Dynamical Percolation*, in C. Bandt, M. Zähle, and P. Mörters (eds.), *Fractal Geometry and Stochastics IV, Progress in Probability*, vol. 61, 145–174, Birkhäuser Basel (2009)
- [21] B. R. Rao, R. Srikanth, C. M. Chandrashekar, and S. Banerjee, *Quantumness of noisy quantum walks: A comparison between measurement-induced disturbance and quantum discord*, Phys. Rev. A, **83**, 064302 (2011)
- [22] A. Ahlbrecht, C. Cedzich, R. Matjeschk, V. Scholz, A. Werner, and R. Werner, *Asymptotic behavior of quantum walks with spatio-temporal coin fluctuations*, Quant. Inf. Proc., **11**, 5, 1219 (2012)
- [23] A. Ahlbrecht, H. Vogts, A. H. Werner, and R. F. Werner, *Asymptotic evolution of quantum walks with random coin*, J. Math. Phys., **52**, 042201 (2011)
- [24] B. Tarasinski, J. K. Asbóth, and J. P. Dahlhaus, *Scattering theory of topological phases in discrete-time quantum walks*, Phys. Rev. A, **89**, 042327 (2014)
- [25] B. Kollár, J. Novotný, T. Kiss, and I. Jex, *Discrete time quantum walks on percolation graphs*, Eur. Phys. J. Plus, **129**, 5, 103 (2014)
- [26] B. Kollár, J. Novotný, T. Kiss, and I. Jex, *Percolation induced effects in two-dimensional coined quantum walks: analytic asymptotic solutions*, New J. Phys., **16**, 2, 023002 (2014)
- [27] B. Kollár, T. Kiss, J. Novotný, and I. Jex, *Asymptotic Dynamics of Coined Quantum Walks on Percolation Graphs*, Phys. Rev. Lett., **108**, 230505 (2012)
- [28] H. Mehrer, *Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes*, Springer Series in Solid-State Sciences, Springer (2007)
- [29] Z. Darázs and T. Kiss, *Pólya number of the continuous-time quantum walks*, Phys. Rev. A, **81**, 062319 (2010)
- [30] X.-K. Zhang, J. Wan, J.-J. Lu, and X.-P. Xu, *Recurrence and Pólya Number of General One-Dimensional Random Walks*, Commun. Theor. Phys., **56**, 2, 293 (2011)
- [31] R. Meyers, *Mathematics of Complexity and Dynamical Systems*, Springer (2011)
- [32] R. Rammal and G. Toulouse, *Random walks on fractal structures and percolation clusters*, J. Phys. Lett. (Paris), **44**, 13 (1983)
- [33] D. J. Wineland, *Nobel Lecture: Superposition, entanglement, and raising Schrödinger's cat*, Rev. Mod. Phys., **85**, 1103 (2013)

-
- [34] S. Haroche, *Nobel Lecture: Controlling photons in a box and exploring the quantum to classical boundary*, Rev. Mod. Phys., **85**, 1083 (2013)
- [35] P. Domokos, *Munkára fogott kvantummechanika*, Magyar Tudomány, **174**, 6 (2013)
- [36] S. N. Bose, *Planck's Law and Light Quantum Hypothesis*, Z. Phys., **26** (1924)
- [37] A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., **3** (1925)
- [38] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science, **269**, 5221, 198 (1995)
- [39] M. Wallquist, K. Hammerer, P. Rabl, M. Lukin, and P. Zoller, *Hybrid quantum devices and quantum engineering*, Phys. Scr., **2009**, T137, 014001 (2009)
- [40] P. Treutlein, C. Genes, K. Hammerer, M. Poggio, and P. Rabl, *Hybrid Mechanical Systems*, in M. Aspelmeyer, T. Kippenberg, and F. Marquardt (eds.), *Cavity Optomechanics*, Quantum Science and Technology, 327–351, Springer Berlin Heidelberg (2014)
- [41] E. A. Cornell and C. E. Wieman, *Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments*, Rev. Mod. Phys., **74**, 875 (2002)
- [42] P. Treutlein, D. Hunger, S. Camerer, T. Hänsch, and J. Reichel, *Bose-Einstein Condensate Coupled to a Nanomechanical Resonator on an Atom Chip*, Phys. Rev. Lett., **99**, 140403 (2007)
- [43] D. Hunger, S. Camerer, T. W. Hänsch, D. König, J. P. Kotthaus, J. Reichel, and P. Treutlein, *Resonant Coupling of a Bose-Einstein Condensate to a Micromechanical Oscillator*, Phys. Rev. Lett., **104**, 143002 (2010)
- [44] S. Iijima, *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature, **354**, 56 (1991)
- [45] O. Kálmán, T. Kiss, J. Fortágh, and P. Domokos, *Quantum Galvanometer by Interfacing a Vibrating Nanowire and Cold Atoms*, Nano Lett., **12**, 1, 435 (2012)
- [46] S. Chu, *Nobel Lecture: The manipulation of neutral particles*, Rev. Mod. Phys., **70**, 685 (1998)
- [47] C. N. Cohen-Tannoudji, *Nobel Lecture: Manipulating atoms with photons*, Rev. Mod. Phys., **70**, 707 (1998)
- [48] W. D. Phillips, *Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms*, Rev. Mod. Phys., **70**, 721 (1998)
- [49] C. H. Townes, *Nobel Lecture: Production of Coherent Radiation by Atoms and Molecules*, in *Nobel Lectures, Physics 1963-1970*, Elsevier Publishing Company (1972)
- [50] N. G. Basov, *Nobel Lecture: Semiconductor Lasers*, in *Nobel Lectures, Physics 1963-1970*, Elsevier Publishing Company (1972)
- [51] A. M. Prokhorov, *Nobel Lecture: Quantum Electronics*, in *Nobel Lectures, Physics 1963-1970*, Elsevier Publishing Company (1972)

- [52] D. Nikogosyan, *Nonlinear Optical Crystals: A Complete Survey*, Springer (2006)
- [53] B. Saleh and M. Teich, *Fundamentals of Photonics*, Wiley Series in Pure and Applied Optics, Wiley (2013)
- [54] J. Klafter and I. Sokolov, *First Steps in Random Walks: From Tools to Applications*, OUP Oxford (2011)
- [55] E. W. Montroll and G. H. Weiss, *Random Walks on Lattices. II*, Jour. Math. Phys., **6**, 2, 167 (1965)
- [56] R. Bapat, *Graphs and Matrices*, Universitext, Springer (2010)
- [57] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*, Lecture Notes in Mathematics, Springer Berlin Heidelberg (1996)
- [58] C. Domb, *On multiple returns in the random-walk problem*, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **50**, 586 (1954)
- [59] P. Erdős and S. Taylor, *Some problems concerning the structure of random walk paths*, Acta Mathematica Hungarica, **11**, 137 (1960)
- [60] L. Lovász, *Random Walks on Graphs: A Survey*, in D. Miklós, V. T. Sós, and T. Szőnyi (eds.), *Combinatorics, Paul Erdős is Eighty*, vol. 2, 353–398, János Bolyai Mathematical Society, Budapest (1996)
- [61] J. Wan and X. Xu, *Pólya number and first return of bursty random walk: Rigorous solutions*, Physica A, **391**, 5, 1919 (2012)
- [62] B. Kollár, M. Štefaňák, T. Kiss, and I. Jex, *Recurrences in three-state quantum walks on a plane*, Phys. Rev. A, **82**, 012303 (2010)
- [63] M. Štefaňák, I. Jex, and T. Kiss, *Recurrence and Pólya Number of Quantum Walks*, Phys. Rev. Lett., **100**, 020501 (2008)
- [64] M. Štefaňák, T. Kiss, and I. Jex, *Recurrence of biased quantum walks on a line*, New Jour. Phys., **11**, 4, 043027 (2009)
- [65] A. Anishchenko, A. Blumen, and O. Mülken, *Enhancing the spreading of quantum walks on star graphs by additional bonds*, Quant. Inf. Proc., **11**, 5, 1273 (2012)
- [66] J. Kempe, *Quantum random walks: An introductory overview*, Contemporary Physics, **44**, 4, 307 (2003)
- [67] S. Venegas-Andraca, *Quantum walks: a comprehensive review*, Quant. Inf. Proc., **11**, 5, 1015 (2012)
- [68] D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe, and U. Vazirani, *Quantum Walks on Graphs*, in *Proceedings of the Thirty-third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC '01, 50–59, ACM, New York, NY, USA (2001)
- [69] M. Hillery, J. Bergou, and E. Feldman, *Quantum walks based on an interferometric analogy*, Phys. Rev. A, **68**, 032314 (2003)

-
- [70] M. Szegedy, *Quantum Speed-Up of Markov Chain Based Algorithms*, in *Proceedings of the 45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, FOCS '04, 32–41, IEEE Computer Society, Washington, DC, USA (2004)
 - [71] D. Angelakis, *Quantum Information Processing: From Theory to Experiment*, NATO science series. Series III, Computer and systems sciences, IOS Press (2006)
 - [72] V. Kendon, *A random walk approach to quantum algorithms*, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **364**, 1849, 3407 (2006)
 - [73] A. Ambainis, *Quantum walk algorithm for element distinctness*, in *Foundations of Computer Science, 2004. Proceedings. 45th Annual IEEE Symposium on*, 22–31 (2004)
 - [74] L. Grover, *A Fast Quantum Mechanical Algorithm for Database Search*, in *Proceedings of the Twenty-eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC '96, 212–219, ACM, New York, NY, USA (1996)
 - [75] M. Santha, *Quantum Walk Based Search Algorithms*, in M. Agrawal, D. Du, Z. Duan, and A. Li (eds.), *Theory and Applications of Models of Computation, Lecture Notes in Computer Science*, vol. 4978, 31–46, Springer Berlin Heidelberg (2008)
 - [76] N. Shenvi, J. Kempe, and K. Whaley, *Quantum random-walk search algorithm*, *Phys. Rev. A*, **67**, 052307 (2003)
 - [77] F. Magniez, A. Nayak, J. Roland, and M. Santha, *Search via Quantum Walk*, *SIAM Journal on Computing*, **40**, 1, 142 (2011)
 - [78] A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann, and D. Spielman, *Exponential Algorithmic Speedup by a Quantum Walk*, in *Proceedings of the Thirty-fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC '03, 59–68, ACM, New York, NY, USA (2003)
 - [79] A. Childs, *Universal Computation by Quantum Walk*, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 180501 (2009)
 - [80] A. Childs, D. Gosset, and Z. Webb, *Universal Computation by Multiparticle Quantum Walk*, *Science*, **339**, 6121, 791 (2013)
 - [81] A. Alberti, W. Alt, R. Werner, and D. Meschede, *Decoherence Models for Discrete-Time Quantum Walks and their Application to Neutral Atom Experiments*, *New J. Phys.*, **16**, 123052 (2014)
 - [82] M. Genske, W. Alt, A. Steffen, A. H. Werner, R. F. Werner, D. Meschede, and A. Alberti, *Electric quantum walks with individual atoms*, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 190601 (2013)
 - [83] J. Du, H. Li, X. Xu, M. Shi, J. Wu, X. Zhou, and R. Han, *Experimental implementation of the quantum random-walk algorithm*, *Phys. Rev. A*, **67**, 042316 (2003)
 - [84] A. Schreiber, A. Gábris, P. Rohde, K. Laiho, M. Štefaňák, V. Potoček, C. Hamilton, I. Jex, and C. Silberhorn, *A 2D Quantum Walk Simulation of Two-Particle Dynamics*, *Science*, **336**, 6077, 55 (2012)

- [85] H. Perets, Y. Lahini, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, and Y. Silberberg, *Realization of Quantum Walks with Negligible Decoherence in Waveguide Lattices*, Phys. Rev. Lett., **100**, 170506 (2008)
- [86] R. Keil, A. Szameit, F. Dreisow, M. Heinrich, S. Nolte, and A. Tünnermann, *Photon correlations in two-dimensional waveguide arrays and their classical estimate*, Phys. Rev. A, **81**, 023834 (2010)
- [87] K. Poullos, R. Keil, D. Fry, J. Meinecke, J. Matthews, A. Politi, M. Lobino, M. Gräfe, M. Heinrich, S. Nolte, A. Szameit, and J. O'Brien, *Quantum Walks of Correlated Photon Pairs in Two-Dimensional Waveguide Arrays*, Phys. Rev. Lett., **112**, 143604 (2014)
- [88] J. Matthews, *Multi-Photon Quantum Information Science and Technology in Integrated Optics*, Springer Theses, Springer Berlin (2012)
- [89] O. Mülken, V. Pernice, and A. Blumen, *Quantum transport on small-world networks: A continuous-time quantum walk approach*, Phys. Rev. E, **76**, 051125 (2007)
- [90] O. Mülken, V. Bierbaum, and A. Blumen, *Coherent exciton transport in dendrimers and continuous-time quantum walks*, J. Chem. Phys., **124**, 12, 124905 (2006)
- [91] J. Dettman, *Introduction to Linear Algebra and Differential Equations*, Dover Books on Mathematics Series, Dover (1986)
- [92] P. Erdős and A. Rényi, *On The Evolution of Random Graphs*, A Matematikai Kutató Intézet Közleményei V., **A/1-2**, 17 (1960)
- [93] P. Erdős and A. Rényi, *On random graphs*, Publicationes Mathematicae Debrecen, **6**, 290 (1959)
- [94] E. N. Gilbert, *Random Graphs*, Ann. Math. Statist., **30**, 4, 1141 (1959)
- [95] B. Bollobás, *Random Graphs*, Cambridge University Press, 2nd ed. (2001)
- [96] S. Janson, T. Luczak, and A. Rucinski, *Random Graphs*, Wiley Series in Discrete Mathematics and Optimization, Wiley (2011)
- [97] R. Durrett, *Random Graph Dynamics*, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press (2006)
- [98] R. Albert and A.-L. Barabási, *Statistical mechanics of complex networks*, Rev. Mod. Phys., **74**, 47 (2002)
- [99] E. Ben-Naim, H. Frauenfelder, and Z. Toroczkai, *Complex Networks*, Lecture Notes in Physics, Springer (2004)
- [100] M. Franceschetti and R. Meester, *Random Networks for Communication: From Statistical Physics to Information Systems*, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press (2008)
- [101] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, *Percolation processes*, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **53**, 629 (1957)
- [102] B. Bollobás and O. Riordan, *Percolation*, Cambridge University Press (2006)

-
- [103] M. Sahini and M. Sahimi, *Applications Of Percolation Theory*, CRC Press (2004)
 - [104] O. Mülken and A. Blumen, *Coherent exciton dynamics and trapping in topologically disordered systems*, Physica E, **42**, 3, 576 (2010)
 - [105] X. P. Xu and F. Liu, *Continuous-time quantum walks on Erdős–Rényi networks*, Phys. Lett. A, **372**, 45, 6727 (2008)
 - [106] E. Agliari, *Trapping of continuous-time quantum walks on Erdős–Rényi graphs*, Physica A, **390**, 11, 1853 (2011)
 - [107] G. Leung, P. Knott, J. Bailey, and V. Kendon, *Coined quantum walks on percolation graphs*, New Jour. Phys., **12**, 12, 123018 (2010)
 - [108] C. M. Chandrashekar and T. Busch, *Quantum percolation and transition point of a directed discrete-time quantum walk*, Sci. Rep., **4**, 6583 (2014)
 - [109] M. Suzuki, *On the convergence of exponential operators – the Zassenhaus formula, BCH formula and systematic approximants*, Commun. Math. Phys., **57**, 3, 193 (1977)
 - [110] J. Geiser, G. Tanoğlu, and N. Gücüyenlen, *Higher order operator splitting methods via Zassenhaus product formula: Theory and applications*, Computers and Mathematics with Applications, **62**, 1994 (2011)
 - [111] J. Novotný, G. Alber, and I. Jex, *Random unitary dynamics of quantum networks*, J. Phys. A, **42**, 28, 282003 (2009)
 - [112] J. Novotný, G. Alber, and I. Jex, *Asymptotic evolution of random unitary operations*, Cent. Eur. J. Phys., **8**, 6, 1001 (2010)
 - [113] J. Novotný, G. Alber, and I. Jex, *Asymptotic Dynamics of Qubit Networks under Randomly Applied Controlled Unitary Transformations*, New J. Phys., **13**, 053052 (2011)
 - [114] X. Xu, *Exact analytical results for quantum walks on star graphs*, J. Phys. A, **42**, 11, 115205 (2009)
 - [115] S. Salimi, *Continuous-time quantum walks on star graphs*, Annals of Physics, **324**, 6, 1185 (2009)
 - [116] B. Kaye, *A Random Walk Through Fractal Dimensions*, Wiley (2008)
 - [117] S. Havlin and D. Ben-Avraham, *Diffusion in disordered media*, Advances in Physics, **51**, 1, 187 (2002)
 - [118] A. Patel and K. S. Raghunathan, *Search on a fractal lattice using a quantum random walk*, Phys. Rev. A, **86**, 012332 (2012)
 - [119] E. Agliari, A. Blumen, and O. Mülken, *Quantum-walk approach to searching on fractal structures*, Phys. Rev. A, **82**, 012305 (2010)
 - [120] T. Shima, *On eigenvalue problems for the random walks on the Sierpinski pre-gaskets*, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, **8**, 1, 127 (1991)

- [121] P. Lara, C. S., R. Portugal, and S. Boettcher, *Quantum walks on Sierpinski gaskets*, Int. Jour. Quant. Inf., **11**, 08, 1350069 (2013)
- [122] Z. Zhang, B. Wu, H. Zhang, S. Zhou, J. Guan, and Z. Wang, *Determining global mean-first-passage time of random walks on Vicsek fractals using eigenvalues of Laplacian matrices*, Phys. Rev. E, **81**, 031118 (2010)
- [123] Y. Shikano and H. Katsura, *Localization and fractality in inhomogeneous quantum walks with self-duality*, Phys. Rev. E, **82**, 031122 (2010)
- [124] E. Domany, S. Alexander, D. Bensimon, and L. Kadanoff, *Solutions to the Schrödinger equation on some fractal lattices*, Phys. Rev. B, **28**, 3110 (1983)
- [125] X. R. Wang, *Localization in fractal spaces: Exact results on the Sierpinski gasket*, Phys. Rev. B, **51**, 9310 (1995)
- [126] M. Li, Y. Liu, and Z.-Q. Zhang, *Photonic band structure of Sierpinski waveguide networks*, Phys. Rev. B, **61**, 16193 (2000)
- [127] W. Sierpiński, *Sur une courbe cantorienne dont tout point est un point de ramification*, Comptes Rendus (Paris), **160**, 302 (1915)
- [128] M. Yamaguchi, M. Hata, and J. Kigami, *Mathematics of Fractals*, Translations of mathematical monographs, American Mathematical Society (1997)
- [129] P. Addison, *Fractals and Chaos: An illustrated course*, Taylor & Francis (1997)
- [130] U. Agarwal and U. Singh, *Graph Theory*, Laxmi Publications Pvt Limited (2009)
- [131] A. Gibbons, *Algorithmic Graph Theory*, Cambridge University Press (1985)
- [132] M. Mitzenmacher and E. Upfal, *Probability and Computing: Randomized Algorithms and Probabilistic Analysis*, Cambridge University Press (2005)
- [133] L. Hogben, *Handbook of Linear Algebra, Second Edition*, Discrete Mathematics and Its Applications, CRC Press (2013)
- [134] J. Bassingthwaighe, L. Liebovitch, and B. West, *Fractal Physiology*, American Physiological Society (1994)
- [135] S. Vrobel, *Fractal Time: Why a Watched Kettle Never Boils*, Studies of nonlinear phenomena in life sciences, World Scientific (2011)
- [136] M. T. Barlow and R. F. Bass, *On the resistance of the Sierpinski carpet*, Proc. R. Soc. Lond. A, **431**, 1882, 345 (1990)
- [137] P. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics*, Cambridge University Press (2010)
- [138] A. Korn and T. Korn, *Matematikai Kézikönyv Műszakiaknak*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest (1975)
- [139] E. Agliari, A. Blumen, and O. Mülken, *Dynamics of continuous-time quantum walks in restricted geometries*, J. Phys. A, **41**, 445301 (2008)

- [140] S. Alexander and R. Orbach, *Density of states on fractals: «fractons»*, J. Phys. Lett. (Paris), **43**, 17, 625 (1982)
- [141] S. Alexander, J. Bernasconi, W. Schneider, and R. Orbach, *Excitation dynamics in random one-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys., **53**, 175 (1981)
- [142] P. Doyle and J. Snell, *Random walks and electric networks*, Carus mathematical monographs, Mathematical Association of America (1984)
- [143] A. Telcs, *The Art of Random Walks*, Lecture Notes in Mathematics, Springer (2006)
- [144] J. Cserti, *Application of the lattice Green's function for calculating the resistance of an infinite network of resistors*, Am. J. Phys., **68**, 10, 896 (2000)
- [145] J. Cserti, G. Dávid, and A. Piróth, *Perturbation of infinite networks of resistors*, Am. J. Phys., **70**, 2, 153 (2002)
- [146] S. Salsa, *Partial Differential Equations in Action: From Modelling to Theory*, Universitext, Springer (2008)
- [147] O. Mülken, A. Volta, and A. Blumen, *Asymmetries in symmetric quantum walks on two-dimensional networks*, Phys. Rev. A, **72**, 042334 (2005)
- [148] P. Gnädig, *Bevezetés a disztribúcióelméletbe és fizikai alkalmazásaiba*, Tankönyvkiadó (1981)
- [149] P. Krapivsky, J. Luck, and K. Mallick, *Survival of Classical and Quantum Particles in the Presence of Traps*, J. Stat. Phys., **154**, 6, 1430 (2014)
- [150] M. Gönülol, E. Aydın, Y. Shikano, and O. Müstecaplıoğlu, *Survival probability in a one-dimensional quantum walk on a trapped lattice*, New J. Phys., **13**, 3, 033037 (2011)
- [151] R. Daudel, *Structure and Dynamics of Molecular Systems: 2 Volumes*, Structure and Dynamics of Molecular Systems, Springer (1985)
- [152] R. Wyatt, *Dynamics of Molecules and Chemical Reactions*, Taylor & Francis (1996)
- [153] R. Setton, *Chemical Reactions in Organic and Inorganic Constrained Systems*, C: Nato advanced science institutes series, Springer (1986)
- [154] R. Klages, G. Radons, and I. Sokolov, *Anomalous Transport: Foundations and Applications*, Wiley (2008)
- [155] P. Iannaccone and M. Khokha, *Fractal Geometry in Biological Systems: An Analytical Approach*, Taylor & Francis (1996)
- [156] R. E. Liesegang, *Über Einige Eigenschaften von Gallerten*, Naturwiss. Wochenschr., **11**, 353 (1896)
- [157] Z. Rácz, *Formation of Liesegang patterns*, Physica A, **274**, 1–2, 50 (1999)
- [158] F. Izsák and I. Lagzi, *Simulation of Liesegang pattern formation using a discrete stochastic model*, Chem. Phys. Lett., **371**, 3–4, 321 (2003)

- [159] M. Barber and B. Ninham, *Random and Restricted Walks: Theory and Applications*, Mathematics and its applications Gordon and Breach, Gordon and Breach (1970)
- [160] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, *Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer*, Jour. Chem. Phys., **129**, 17 (2008)
- [161] O. Mülken, A. Blumen, T. Amthor, C. Giese, M. Reetz-Lamour, and M. Weidemüller, *Survival Probabilities in Coherent Exciton Transfer with Trapping*, Phys. Rev. Lett., **99**, 090601 (2007)
- [162] E. Agliari, O. Mülken, and A. Blumen, *Continuous-Time Quantum Walks and Trapping*, Int. J. Bifurcation Chaos, **20**, 02, 271 (2010)
- [163] P. E. Parris, *One-dimensional quantum transport in the presence of traps*, Phys. Rev. B, **40**, 4928 (1989)
- [164] M. M. Sternheim and J. F. Walker, *Non-Hermitian Hamiltonians, Decaying States, and Perturbation Theory*, Phys. Rev. C, **6**, 114 (1972)
- [165] O. Mülken, V. Pernice, and A. Blumen, *Slow excitation trapping in quantum transport with long-range interactions*, Phys. Rev. E, **78**, 021115 (2008)
- [166] N. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland Personal Library, Elsevier Science (2011)
- [167] M. G. Cosenza and R. Kapral, *Coupled maps on fractal lattices*, Phys. Rev. A, **46**, 1850 (1992)
- [168] A. Blumen and A. Jurjiu, *Multifractal spectra and the relaxation of model polymer networks*, The Journal of Chemical Physics, **116**, 6, 2636 (2002)
- [169] C. J. Riley, *Reaction and Diffusion on the Sierpinski Gasket*, Ph.D. thesis, University of Manchester (2006)
- [170] J. Epperson, *An Introduction to Numerical Methods and Analysis*, Wiley (2013)
- [171] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 3rd ed. (1999)
- [172] M. Kupferschmid, *Classical FORTRAN: Programming for Engineering and Scientific Applications*, Taylor & Francis (2002)
- [173] H. Fang and Y. Saad, *A filtered Lanczos procedure for extreme and interior eigenvalue problems*, Tech. Rep. Report umsi-2011-xx, Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota (2011)
- [174] S. Heilman and R. Strichartz, *Homotopies of eigenfunctions and the spectrum of the Laplacian on the Sierpinski carpet*, Fractals, **18**, 01, 1 (2010)
- [175] M. Begue, T. Kalloniatis, and R. Strichartz, *Harmonic functions and the spectrum of the Laplacian on the Sierpinski carpet*, Fractals, **21**, 01, 1350002 (2013)

-
- [176] D. Shanbhag and C. Rao, *Stochastic Processes: Modelling and Simulation*, Handbook of statistics, Elsevier (2003)
 - [177] K. Suchecki and J. A. Hołyst, *Voter model on Sierpinski fractals*, Physica A, **362**, 2, 338 (2006)
 - [178] A. Franz, C. Schulzky, and K. Hoffmann, *The Einstein relation for finitely ramified Sierpinski carpets*, Nonlinearity, **14**, 5, 1411 (2001)
 - [179] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. Hoffmann, *Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets*, Comput. Phys. Commun., **134**, 3, 307 (2001)
 - [180] O. Mülken and A. Szameit, private communication
 - [181] K. C. Schwab and M. L. Roukes, *Putting mechanics into Quantum mechanics*, Physics Today, **58** (2005)
 - [182] V. Sazonova, Y. Yaish, H. Ustunel, D. Roundy, T. Arias, and P. McEuen, *A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator*, Nature, **431**, 7006, 284 (2004)
 - [183] K. Jensen, K. Kim, and A. Zettl, *An atomic-resolution nanomechanical mass sensor*, Nature Nanotech., **3**, 533 (2008)
 - [184] J. Chaste, A. Eichler, J. Moser, G. Ceballos, R. Rurali, and A. Bachtold, *A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution*, Nature Nanotech., **7**, 301 (2012)
 - [185] R. A. Barton, I. R. Storch, V. P. Adiga, R. Sakakibara, B. R. Cipriany, B. Ilic, S. P. Wang, P. Ong, P. L. McEuen, J. M. Parpia, and H. G. Craighead, *Photothermal Self-Oscillation and Laser Cooling of Graphene Optomechanical Systems*, Nano Lett., **12**, 9, 4681 (2012)
 - [186] M. Korppi, A. Jöckel, M. T. Rakher, S. Camerer, D. Hunger, T. Hänsch, and P. Treutlein, *Hybrid atom-membrane optomechanics*, EPJ Web of Conferences, **57**, 03006 (2013)
 - [187] M. Aspelmeyer, S. Gröblacher, K. Hammerer, and N. Kiesel, *Quantum optomechanics - throwing a glance*, J. Opt. Soc. Am. B, **27**, 6, A189 (2010)
 - [188] J. Li and K. Zhu, *Generalized Optomechanics and Its Application: Quantum Optical Properties of Generalized Optomechanical System*, World Scientific (2013)
 - [189] A. Jöckel, A. Faber, T. Kampschulte, M. Korppi, M. T. Rakher, and P. Treutlein, *Sympatric cooling of a membrane oscillator in a hybrid mechanical–atomic system*, Nature Nanotech., **10**, 55 (2015)
 - [190] P. Schneeweiss, M. Gierling, G. Visanescu, D. Kern, T. Judd, A. Günther, and J. Fortágh, *Dispersion forces between ultracold atoms and a carbon nanotube*, Nature Nanotech., **7**, 8, 515 (2012)
 - [191] B. Jetter, J. Märkle, P. Schneeweiss, M. Gierling, S. Scheel, A. Günther, J. Fortágh, and T. Judd, *Scattering and absorption of ultracold atoms by nanotubes*, New J. Phys., **15**, 073009 (2013)
 - [192] M. Fink, T. O. Müller, J. Eiglsperger, and J. Madroñero, *Interaction of atomic quantum gases with a single carbon nanotube*, Europhys. Lett., **102**, 3, 33001 (2013)

- [193] S. Ribeiro and S. Scheel, *Controlled ripple texturing of suspended graphene membranes due to coupling with ultracold atoms*, Phys. Rev. A, **88**, 052521 (2013)
- [194] S. Hong, M. S. Grinolds, P. Maletinsky, R. L. Walsworth, M. D. Lukin, and A. Yacoby, *Coherent, mechanical control of a single electronic spin*, Nano Lett., **12**, 8, 3920 (2012)
- [195] S. Wildermuth, S. Hofferberth, I. Lesanovsky, E. Haller, L. M. Andersson, S. Groth, I. Bar-Joseph, P. Kruger, and J. Schmiedmayer, *Bose-Einstein condensates Microscopic magnetic-field imaging*, Nature, **435**, 440 (2005)
- [196] M. Vengalattore, J. M. Higbie, S. R. Leslie, J. Guzman, L. E. Sadler, and D. M. Stamper-Kurn, *High-Resolution Magnetometry with a Spinor Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett., **98**, 200801 (2007)
- [197] N. Lo Gullo, T. Busch, G. M. Palma, and M. Paternostro, *Probing mechanical quantum coherence with an ultracold-atom meter*, Phys. Rev. A, **84**, 063815 (2011)
- [198] S. K. Steinke, S. Singh, M. E. Tasgin, P. Meystre, K. C. Schwab, and M. Vengalattore, *Quantum-measurement backaction from a Bose-Einstein condensate coupled to a mechanical oscillator*, Phys. Rev. A, **84**, 023841 (2011)
- [199] D. Hunger, S. Camerer, M. Korppi, A. Jöckel, T. W. Hänsch, and P. Treutlein, *Coupling ultracold atoms to mechanical oscillators*, Comptes Rendus Physique, **12**, 9-10, 871 (2011)
- [200] P. G. Petrov, S. Machluf, S. Younis, R. Macaluso, T. David, B. Hadad, Y. Japha, M. Keil, E. Joselevich, and R. Folman, *Trapping cold atoms using surface-grown carbon nanotubes*, Phys. Rev. A, **79**, 043403 (2009)
- [201] B. Murphy and L. V. Hau, *Electro-Optical Nanotraps for Neutral Atoms*, Phys. Rev. Lett., **102**, 033003 (2009)
- [202] A. Tang, *Fundamentals of Optical Parametric Processes and Oscillations*, Handbook of laser science and technology, Taylor & Francis (1996)
- [203] M. Marhic, *Fiber Optical Parametric Amplifiers, Oscillators and Related Devices*, Cambridge University Press (2008)
- [204] C. Davis, *Lasers and Electro-optics: Fundamentals and Engineering*, Cambridge University Press (1996)
- [205] T. Brabec, *Strong Field Laser Physics*, Springer Series in Optical Sciences, Springer (2008)
- [206] C. Klempt, O. Topic, G. Gebreyesus, M. Scherer, T. Henninger, P. Hyllus, W. Ertmer, L. Santos, and J. J. Arlt, *Parametric Amplification of Vacuum Fluctuations in a Spinor Condensate*, Phys. Rev. Lett., **104**, 195303 (2010)
- [207] A. Eichler, J. Chaste, J. Moser, and A. Bachtold, *Parametric Amplification and Self-Oscillation in a Nanotube Mechanical Resonator*, Nano Lett., **11**, 7, 2699 (2011)
- [208] C.-C. Wu and Z. Zhong, *Parametric amplification in single-walled carbon nanotube nanoelectromechanical resonators*, Appl. Phys. Lett., **99**, 8 (2011)

-
- [209] S. Barnett and P. Radmore, *Methods in Theoretical Quantum Optics*, Oxford Series in Optical and Imaging Sciences, Clarendon Press (2002)
 - [210] C. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics*, Springer Series in Synergetics, Springer (2004)
 - [211] J. Rammer, *Quantum Transport Theory*, Frontiers in Physics Series, Westview Press (2004)
 - [212] J. D. Weinstein and K. G. Libbrecht, *Microscopic magnetic traps for neutral atoms*, Phys. Rev. A, **52**, 4004 (1995)
 - [213] R. Folman, P. Krüger, J. Schmiedmayer, J. Denschlag, and C. Henkel, *Microscopic atom optics: From wires to an atom chip*, Advances in Atomic Molecular and Optical Physics, **48**, 263 (2002)
 - [214] J. Fortágh and C. Zimmermann, *Toward Atom Chips*, Science, **307**, 5711, 860 (2005)
 - [215] J. Reichel and V. Vuletic, *Atom Chips*, Wiley (2011)
 - [216] J. Fortágh and C. Zimmermann, *Magnetic microtraps for ultracold atoms*, Rev. Mod. Phys., **79**, 235 (2007)
 - [217] S. Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press (2012)
 - [218] C. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge University Press (2002)
 - [219] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-body Systems*, OUP Oxford (2012)
 - [220] T. Ho, *Spinor Bose Condensates in Optical Traps*, Phys. Rev. Lett., **81**, 742 (1998)
 - [221] P. Meystre, *Atom optics*, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, vol. 33, Springer (2001)
 - [222] D. Choi and Q. Niu, *Bose-Einstein Condensates in an Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett., **82**, 2022 (1999)
 - [223] R. Kaiser, C. Westbrook, and F. David, *Coherent atomic matter waves - Ondes de matiere coherentes: 27 July - 27 August 1999*, A Nato Advanced Study Institute, Springer (2001)
 - [224] C. E. Wieman, S. Stringari, and M. Inguscio, *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*, International School of Physics “Enrico Fermi”, IOS Press (1999)
 - [225] A. Csordás and R. Graham, *Collective excitations in Bose-Einstein condensates in triaxially anisotropic parabolic traps*, Phys. Rev. A, **59**, 1477 (1999)
 - [226] J. D. Jackson, *Klasszikus elektrodinamika*, Typotex Kiadó (2012)
 - [227] B. Witkamp, M. Poot, and H. S. J. van der Zant, *Bending-Mode Vibration of a Suspended Nanotube Resonator*, Nano Letters, **6**, 12, 2904 (2006)

- [228] B. Lassagne, D. Garcia-Sanchez, A. Aguasca, and A. Bachtold, *Ultrasensitive Mass Sensing with a Nanotube Electromechanical Resonator*, Nano Lett., **8**, 11, 3735 (2008)
- [229] J. Chaste, M. Sledzinska, M. Zdrojek, J. Moser, and A. Bachtold, *High-frequency nanotube mechanical resonators*, App. Phys. Lett., **99**, 21, 213502 (2011)
- [230] S. Zippilli, G. Morigi, and A. Bachtold, *Cooling Carbon Nanotubes to the Phononic Ground State with a Constant Electron Current*, Phys. Rev. Lett., **102**, 096804 (2009)
- [231] S. Will, *From Atom Optics to Quantum Simulation: Interacting Bosons and Fermions in Three-Dimensional Optical Lattice Potentials*, Springer Theses, Springer (2012)
- [232] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications*, A Wiley-Interscience publication, Wiley (1998)
- [233] M. Peskin and D. Schroeder, *An Introduction To Quantum Field Theory*, Frontiers in physics, Westview Press (1995)
- [234] Z. Kurucz, J. H. Wesenberg, and K. Mølmer, *Spectroscopic properties of inhomogeneously broadened spin ensembles in a cavity*, Phys. Rev. A, **83**, 053852 (2011)
- [235] F. Friedlander and M. Joshi, *Introduction to the Theory of Distributions*, Cambridge University Press (1998)
- [236] H. Chiu, P. Hung, H. Postma, and M. Bockrath, *Atomic-Scale Mass Sensing Using Carbon Nanotube Resonators*, Nano Lett., **8**, 12, 4342 (2008)
- [237] P. Julienne, F. Mies, E. Tiesinga, and C. Williams, *Collisional Stability of Double Bose Condensates*, Phys. Rev. Lett., **78**, 1880 (1997)
- [238] J. Söding, D. Guéry-Odelin, P. Desbiolles, F. Chevy, H. Inamori, and J. Dalibard, *Three-body decay of a rubidium Bose–Einstein condensate*, App. Phys. B, **69**, 4, 257 (1999)
- [239] J. Moser, A. Eichler, J. Güttinger, M. I. Dykman, and A. Bachtold, *Nanotube mechanical resonators with quality factors of up to 5 million*, Nature Nanotech., **9**, 1007–1011 (2014)
- [240] A. Hüttel, G. Steele, B. Witkamp, M. Poot, L. Kouwenhoven, and H. van der Zant, *Carbon Nanotubes as Ultrahigh Quality Factor Mechanical Resonators*, Nano Lett., **9**, 7, 2547 (2009)
- [241] V. Sazonova, *A tunable carbon nanotube resonator*, Ph.D. thesis, Cornell University (2006)
- [242] Z. Yao, C. Kane, and C. Dekker, *High-Field Electrical Transport in Single-Wall Carbon Nanotubes*, Phys. Rev. Lett., **84**, 2941 (2000)
- [243] R. Fermani, S. Scheel, and P. Knight, *Trapping cold atoms near carbon nanotubes: Thermal spin flips and Casimir-Polder potential*, Phys. Rev. A, **75**, 062905 (2007)
- [244] A. Eichler, J. Moser, J. Chaste, M. Zdrojek, I. Wilson-Rae, and A. Bachtold, *Nonlinear damping in mechanical resonators made from carbon nanotubes and graphene*, Nature Nanotech., **6**, 339 (2011)

- [245] R. Lifshitz and M. C. Cross, *Nonlinear Dynamics of Nanomechanical and Micromechanical Resonators*, 1–52, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2009)
- [246] J. Bunch, *NEMS: Putting a damper on nanoresonators*, Nature Nanotech., **6**, 331 (2011)

Kevés szabadsági fokú kvantumrendszerek dinamikai tulajdonságai

A doktori értekezés összefoglalása

Darázs Zoltán

Doktori értekezésem első részében folytonos idejű kvantumos bolyongások tulajdonságait vizsgáltam. Dinamikusan perkolált gráfokon történő folytonos idejű kvantumos bolyongások esetén analitikusan megmutattam, hogy abban a határesetben, amikor a gráf két, egymást követő megváltozása közötti időtartam nullához tart, a perkoláció hatása a bolyongás dinamikájában az idő átskálázásában jelentkezik. Numerikusan megvizsgáltam, hogyan alakul az időfejlődés akkor, amikor a gráf két megváltozása közötti időtartam véges. Ekkor a kezdeti időfejlődést helyesen írja le a skálázott dinamika, a lépésköz pontos megválasztásával pedig a felállított modell érvényességi tartománya akár nagy időintervallumra is kiterjeszthető.

Ezt követően a Sierpiński-háromszög és a Sierpiński-szőnyeg véges generációinak megfelelő gráfokon, valamint ezek duálisán történő folytonos idejű kvantumos bolyongások transzporttulajdonságait tanulmányoztam. A Sierpiński-háromszög és a duálisa esetén a visszatérési valószínűség nem a klasszikus esetben ismert spektrál dimenzió szerinti ekvipartíciós értékhez tartó lecsengést mutatja, hanem lokalizáció figyelhető meg a rendszerben. A Sierpiński-szőnyeg és a duálisa esetén a visszatérési valószínűség sokkal erősebb lecsengést mutat, tehát a transzport hatékonyabb mint a Sierpiński-háromszögek esetén.

Az értekezés második részében Bose-Einstein kondenzátum és áramjárta rezgő nanovezeték magnetomechanikai csatolását vizsgáltam. Megmutattam, hogy a rendszerben a csatolás a nanovezeték mechanikai rezgésének parametrikus erősítésére vezet. A kondenzátumot egy rezervoárként, a nanodrótot pedig egy kvantált oszcillátorként modellezve levezettem a rendszert leíró Hamilton-operátort. A rendszerben fellépő veszteségek miatt a parametrikus erősítés csak egy kritikus csatolási állandó felett valósul meg. A kondenzátumon belül a mágneses teret konstansnak véve ez a küszöbérték analitikusan meghatározható, valamint a modell szerint a nanodrót frekvenciájának elhangolódása is jelentős lehet. Realisztikus paramétereket véve numerikusan megmutattam, hogy az egzakt mágneses tér figyelembevételével kapott eredmények összhangban vannak az elméleti eredményekkel, és a csatolási állandó nagysága ezen paraméterekkel a küszöbérték fölött lehet.

Dynamical properties of quantum systems with few degree of freedom

Summary of the Ph.D. thesis

Zoltán Darázs

In the first part of my thesis I have considered the dynamics and transport properties of continuous-time quantum walks (CTQWs) on different structures: on dynamical percolation graphs and on Sierpiński-fractals. I have analytically proved that on dynamical percolation graphs the percolation leads to a time rescaling in the dynamics of the walk if the time between two consecutive changes of the graph tends to zero. I have examined numerically how we can describe the time evolution of CTQWs if the time between the changes of the graph is finite. The scaled dynamics is a good approximation for the initial stage of the time evolution. With a properly chosen small time step, our model can be extended to an arbitrary large time interval.

I have considered the transport properties of CTQWs on the finite generations of the Sierpiński-gasket and the Sierpiński-carpet and on their duals. For the Sierpiński-gasket and its dual the return probability does not show the classical decay to the equipartition value with the spectral dimension, but we can see localization in the system. For the Sierpiński-carpet and its dual the return probability shows a faster decay, therefore the transport is more efficient in these cases compared to the Sierpiński-gaskets.

In the second part of my thesis, I have studied the magnetomechanical coupling of a Bose-Einstein condensate and a current-carrying, oscillating nanowire. I showed that the coupling in the system leads to the parametric amplification of the mechanical vibrations of the suspended nanowire. Describing the condensate as a reservoir, and the nanowire as a quantized harmonic oscillator, I have determined the corresponding Hamilton-operator. Because of the losses in the system, the amplification has a threshold: the amplifier gain should compensate the losses. Assuming that the magnetic field in the volume of the condensate is constant, the threshold in the collective coupling constant can be analytically calculated. With realistic parameters, using the exact form of the magnetic field I have shown numerically that the analytic model gives a good approximation for the threshold, and the value of the collective coupling constant is above the threshold.

³⁸ADATLAP

a doktori értekezés nyilvánosságra hozatalához

I. A doktori értekezés adatai

A szerző neve: Darázs Zoltán

MTMT-azonosító: 10018730

A doktori értekezés címe és alcíme:

Kevés szabadsági fokú kvantumrendszerek dinamikai tulajdonságai

DOI-azonosító³⁹: 10.15476/ELTE.2015.055

A doktori iskola neve: ELTE TTK Fizika Doktori Iskola

A doktori iskolán belüli doktori program neve: Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája program

A témavezető neve és tudományos fokozata: Dr. Kiss Tamás, tudományos főmunkatárs

A témavezető munkahelye: MTA Wigner FK SZFI Kvantumoptikai és Kvantuminformatikai Osztály

II. Nyilatkozatok

A doktori értekezés szerzőjeként⁴⁰

a) hozzájárulok, hogy a doktori fokozat megszerzését követően a doktori értekezésem és a tézisek nyilvánosságra kerüljenek az ELTE Digitális Intézményi Tudástárban. Felhatalmazom a Természettudományi Kar Tudományszervezési és Egyetemközi Kapcsolatok Osztályának ügyintézőjét, hogy az értekezést és a téziseket feltöltse az ELTE Digitális Intézményi Tudástárba, és ennek során kitöltse a feltöltéshez szükséges nyilatkozatokat.

b) kérem, hogy a mellékelt kérelemben részletezett szabadalmi, illetőleg oltalmi bejelentés közzétételéig a doktori értekezést ne bocsássák nyilvánosságra az Egyetemi Könyvtárban és az ELTE Digitális Intézményi Tudástárban;⁴¹

c) kérem, hogy a nemzetbiztonsági okból minősített adatot tartalmazó doktori értekezést a minősítés (dátum)-ig tartó időtartama alatt ne bocsássák nyilvánosságra az Egyetemi Könyvtárban és az ELTE Digitális Intézményi Tudástárban;⁴²

d) kérem, hogy a mű kiadására vonatkozó mellékelt kiadó szerződésre tekintettel a doktori értekezést a könyv megjelenéséig ne bocsássák nyilvánosságra az Egyetemi Könyvtárban, és az ELTE Digitális Intézményi Tudástárban csak a könyv bibliográfiai adatait tegyék közzé. Ha a könyv a fokozatszerzést követően egy évig nem jelenik meg, hozzájárulok, hogy a doktori értekezésem és a tézisek nyilvánosságra kerüljenek az Egyetemi Könyvtárban és az ELTE Digitális Intézményi Tudástárban.⁴³

2. A doktori értekezés szerzőjeként kijelentem, hogy

a) az ELTE Digitális Intézményi Tudástárba feltöltendő doktori értekezés és a tézisek saját eredeti, önálló szellemi munkám és legjobb tudomásom szerint nem sértem vele senki szerzői jogait;

b) a doktori értekezés és a tézisek nyomtatott változatai és az elektronikus adathordozón benyújtott tartalmak (szöveg és ábrák) mindenben megegyeznek.

3. A doktori értekezés szerzőjeként hozzájárulok a doktori értekezés és a tézisek szövegének plágiumkereső adatbázisba helyezéséhez és plágiumellenőrző vizsgálatok lefuttatásához.

Kelt: Budapest, 2015.03.25.

.....
Darázs Zoltán
.....
a doktori értekezés szerzőjének aláírása

³⁸ Beiktatta az Egyetemi Doktori Szabályzat módosításáról szóló CXXXIX/2014. (VI. 30.) Szen. sz. határozat. Hatályos: 2014. VII.1. napjától.

³⁹ A kari hivatal ügyintézője tölti ki.

⁴⁰ A megfelelő szöveg aláhúzendó.

⁴¹ A doktori értekezés benyújtásával egyidejűleg be kell adni a tudományági doktori tanácshoz a szabadalmi, illetőleg oltalmi bejelentést tanúsító okiratot és a nyilvánosságra hozatal elhalasztása iránti kérelmet.

⁴² A doktori értekezés benyújtásával egyidejűleg be kell nyújtani a minősített adatra vonatkozó közokiratot.

⁴³ A doktori értekezés benyújtásával egyidejűleg be kell nyújtani a mű kiadásáról szóló kiadói szerződést.